目　　录

第1章　量子力学的物理基础

1.1　几个常见数值

题 1.1　在宏观世界里，量子现象常常可以忽略，对下列诸情况，在数值上加以证明：(1) 长 $l = 1\text{m}$，质量 $m = 1\text{kg}$ 单摆的零点振荡的振幅；(2) 质量 $m = 5\text{g}$，以速度 10cm/s 向一刚性障碍物(高 5cm，宽 1cm)运动的子弹的透射率；(3) 质量 $m = 0.1\text{kg}$，以速度 0.5m/s 运动的钢球被尺寸为 $1\text{m} \times 1.5\text{m}$ 的窗子所衍射.

解　(1) 由 Virial 定理可推知，谐振子的平均势能 $\langle V\rangle = \langle T\rangle = \dfrac{E}{2}$，再由谐振子的零点振荡能为 $\dfrac{\hbar\omega}{2}$，可得

$$\frac{m\omega^2 A^2}{2} = \frac{\hbar\omega}{4}$$

式中：A 为对应零点能的均方根振幅，所以

$$A = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m}\sqrt{\frac{l}{g}}} \approx 0.41 \times 10^{-17}\,\text{m}$$

可见宏观振子的零点振荡实际上是可以忽略不计的 $\left(A \text{ 也可用} \sqrt{\int \psi_0^*(x) x^2 \psi_0(x) \mathrm{d}x} \text{ 求} \right)$.

(2) 如果把障碍物的宽度看成是势垒的厚度 a，把子弹透射看成是越过障碍物所设置的重力势垒，则透射概率

$$T \approx \exp\left[-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)} \right]$$

这里 $V_0 = mgH, E = \dfrac{1}{2}mv^2$，则

$$T \approx \exp\left\{ -\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m\left(mgH - \frac{mv^2}{2} \right)} \right\} \approx e^{-0.9\times 10^{30}}$$

(3) 入射钢球的 de Broglie 波长为

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \approx 1.3 \times 10^{-30}\,\text{cm}$$

方形窗的水平和垂直方向的衍射角分别为

$$\theta_\text{h} \approx \frac{\lambda}{D} \approx 1.3 \times 10^{-32}\,\text{rad}$$

$$\theta_1 \approx \frac{\lambda}{L} \approx 0.9 \times 10^{-32}\,\text{rad}$$

1.2　基本量的数值估计

题 1.2　用$\hbar$，e，c，m(电子质量)，M(质子质量)表示下列每个量，给出粗略的数值估计：(1) Bohr 半径(cm)；(2) 氢原子结合能(eV)；(3) Bohr 磁子；(4) 电子的 Compton 波长(cm)；(5) 经典电子半径(cm)；(6) 电子静止能量(MeV)；(7) 质子静止能量(MeV)；(8) 精细结构常数；(9) 典型的氢原子精细结构分裂.

解　(1) $a=\dfrac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}=5.29\times10^{-9}\text{cm}$；

(2) $E=\dfrac{me^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2}=13.605\,\text{eV}$；

(3) $\mu_B=\dfrac{e\hbar}{2m}=5.788\times10^{-11}\text{MeV/T}$；

(4) $\lambda_C=\dfrac{h}{mc}=2.426\times10^{-10}\text{cm}$；

(5) $r_{cl}=\dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 mc^2}=2.817\times10^{-13}\text{cm}$；

(6) $E_e=mc^2=0.511\,\text{MeV}$；

(7) $E_p=Mc^2=938.272\text{MeV}$；

(8) $\alpha=\dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}=7.297\times10^{-3}\approx\dfrac{1}{137}$；

(9) $\Delta E=\dfrac{1}{8}\alpha^4mc^2=1.8\times10^{-4}\text{eV}$.

1.3　几个重要数值的量级

题 1.3　导出、估计、猜测或背出下列数值(精确到一个数量级范围内)：(1) 电子的 Thomson 截面；(2) 氢原子的电离能；(3) 氢原子中基态能级的超精细分裂能量；(4) ${}^7_3\text{Li}(Z=3)$核的磁偶极矩；(5) 质子和中子质量差；(6) ${}^4\text{He}$ 核的束缚能；(7) 最大稳定核的半径；(8) π^0介子的寿命；(9) μ^-介子的寿命；(10) 自由中子的寿命.

解　(1) $\sigma=\dfrac{8\pi}{3}r_e^2=6.56\times10^{-31}\text{m}^2$；

(2) $I=\dfrac{e^2}{2a}=13.6\,\text{eV}$；

(3) $\Delta E_{\text{fine}}\approx13.6\times\left(\dfrac{1}{137}\right)^2\approx10^{-4}\text{eV}$，$\Delta E_{\text{super}}\approx\Delta E_{\text{fine}}\times10^{-3}\approx10^{-7}\text{eV}$；

(4) $\mu=1.67\times10^{-26}\text{J/T}$；

(5) $\Delta m=m_p-m_n=-2.3\times10^{-30}\text{kg}$；

(6) $E=4\times7=28\,\text{MeV}$；

(7) 在核力范围内，$r=1.4A^{1/3}\text{fm}=1.4\times(100)^{1/3}\text{fm}\approx6.5\,\text{fm}$；

(8) $\tau=0.828\times10^{-16}\text{s}$；

(9) 衰变是弱相互作用过程，$\tau=2.2\times10^{-6}\text{s}$；

(10) $\tau_n\approx15\,\text{min}=9\times10^2\text{s}$.

1.4 几个重要实验的意义

题 1.4 指出下列实验中，哪些实验表明了辐射场的粒子性？哪些实验主要证明能量交换的量子性？哪些实验主要表明物质粒子的波动性？简述理由. (1) 光电效应；(2) 黑体辐射谱；(3) Franck-Hertz 实验；(4) Davisson-Germer 实验；(5) Compton 散射.

解 光电效应和 Compton 散射说明了光场的粒子性. 光电效应表明每个光子的能量为 $\hbar\omega$，Compton 散射更进一步说明光子的动量为 h/λ，并且说明光子与物质相互作用时，满足动量守恒与能量守恒.

黑体辐射谱与 Franck-Hertz 实验说明，黑体(常描述为一谐振子体系)与辐射场的能量交换过程、电子与原子的碰撞过程，能量交换是量子化的，即原子的能级是量子化的.

Davisson-Germer 实验(电子在晶体中发生衍射)，则主要表现出电子的波动性，验证了 de Broglie 波长与动量的关系，$\lambda=h/p$.

1.5 电子的双缝干涉

题 1.5 考虑如下实验：一束电子射向刻有 A、B 两缝的平板，板外是一装有检测器阵列的屏幕. 利用检测器能定出电子撞击屏幕的位置. 在下列各种情形下，画出入射电子强度随屏幕位置(X)变化的草图，给出简单解释. (1) A 缝开启，B 缝关闭. (2) B 缝开启，A 缝关闭. (3) 两缝均开启. (4) 将 Stern-Gerlach 装置连在缝上，使得只有 $S_x=\frac{1}{2}\hbar$ 电子能通过 A，同时只有 $S_x=-\frac{1}{2}\hbar$ 电子能通过 B. (5) 只有 $S_x=\frac{1}{2}\hbar$ 电子能通过 A，同时只有 $S_x=\frac{1}{2}\hbar$ 电子能通过 B. 如果使束流强度低到在任一时刻只有一个电子能通过该装置，结果有什么变化？

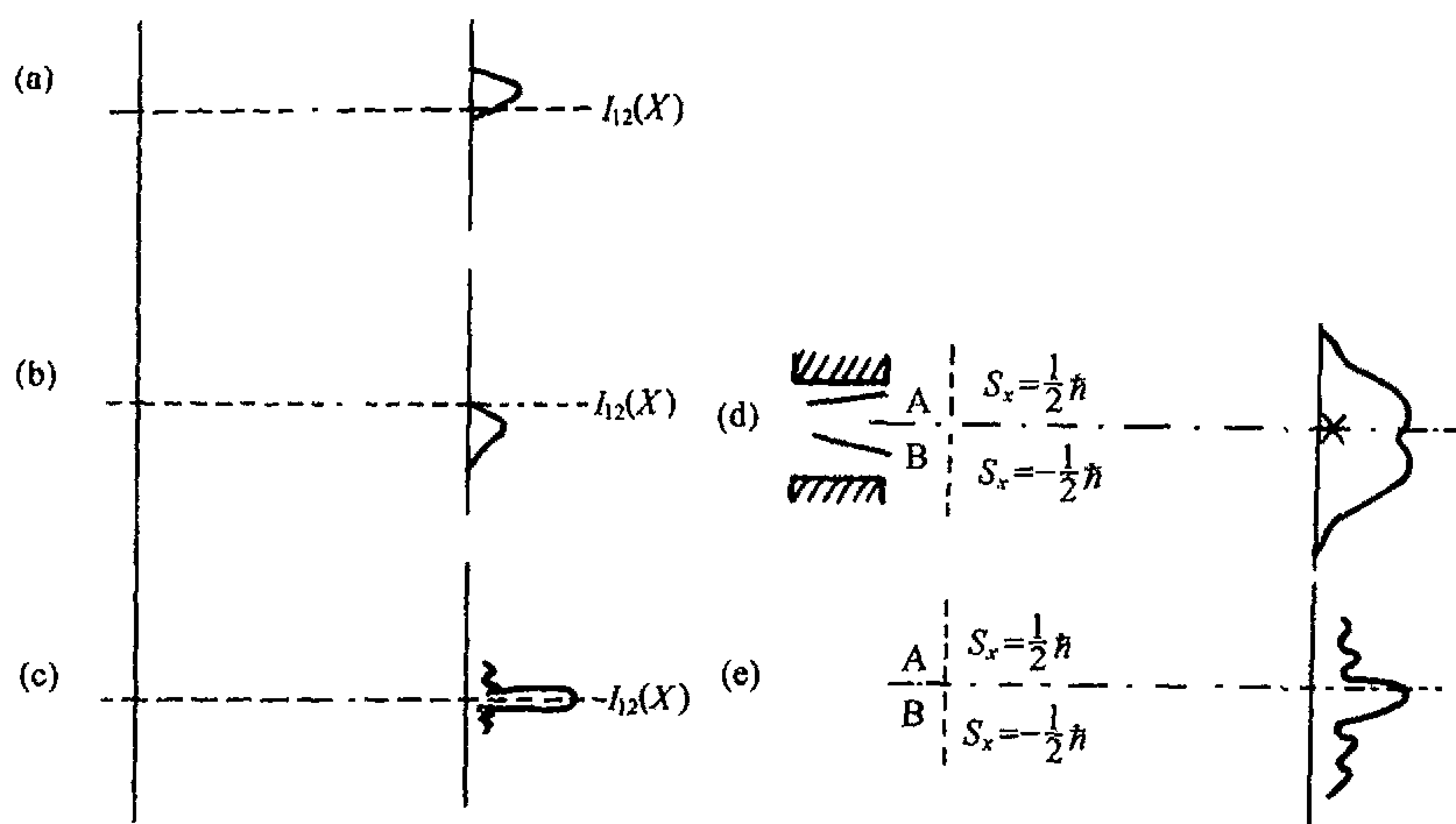
解 如题图 1.5.

(1) 在屏处测得的是电子穿过孔 A 的概率 [题图 1.5(a)].

(2) 在屏处测得电子穿过孔 B 的概率 [题图 1.5(b)].

(3) $I_{12}(X)=I_1+I_2+(\text{干涉项})\neq I_1+I_2$ [题图 1.5(c)].

(4) 通过缝 A 的电子和通过缝 B 的电子处于不同的本征态，无干涉项，屏上得到两单缝情况的强度叠加和 [题图 1.5(d)]



题图 1.5

(5) 同 (3)，但强度减少一半.

由于电子波函数的自身干涉，对入射强度弱到单电子情形，各种情况结果不变.

1.6 电子、中子、光子的 de Broglie 波长

题 1.6 导出非相对论电子、中子和光子的 de Broglie 波长.

解 因为

$$P=\frac{h}{\lambda},\qquad E=\frac{P^2}{2m}$$

式中：P, E 分别是自由粒子的动量和能量；m 为质量；h 为 Planck 常量. 由上两式可以导出

$$\lambda=\frac{h}{\sqrt{2mE}}$$

对于光子而言

$$\lambda=\frac{c}{\nu}=\frac{hc}{E}$$

取 $E=1\text{eV}$，容易验算

$$\lambda_e=\frac{h}{\sqrt{2m_eE}}=\frac{6.626\times10^{-34}}{\sqrt{2\times9.109\times10^{-31}\times1.6\times10^{-19}}}=12.26(\text{Å})$$

$$\lambda_n=\frac{h}{\sqrt{2m_nE}}=\frac{6.626\times10^{-34}}{\sqrt{2\times1.675\times10^{-27}\times1.6\times10^{-19}}}=0.286(\text{Å})$$

$$\lambda_\gamma=\frac{hc}{E}=\frac{6.626\times10^{-34}\times2.998\times10^{8}}{1.6\times10^{-19}}=1.241\times10^{4}\,(\text{Å})$$

1.7　原子的稳定性

题 1.7　在量子力学产生之前，一个大的理论问题是如何防止原子发光，解释之. 在量子力学产生之后，一个大的理论问题是如何使处于激发态的原子发光，解释之. 是什么使激发态发光?

解　在量子力学产生之前，根据原子的行星模型，电子一般绕核做椭圆运动，由经典动力学知，加速运动的带电粒子必伴随着辐射，也即原子一定发光. 这时电子不断损失能量，最后要落到核上，但事实是电子并不落到核上，基态原子稳定并不发光.

在量子力学产生之后，根据量子力学基本原理，若无外界作用，原子的 Hamilton 量是不含时的，处于激发态(仍是定态)的原子应永远处于该激发态，即处于激发态的原子不会自行发光. 但实际上原子会自发辐射.

根据量子电动力学，辐射场和原子中的电子形成两个量子力学系统，它们之间的相互作用包含了单光子产生算子 $a^\dagger$ 项，这项即使在初始无光子时也不为零. 正是这种相互作用使激发态原子发光，产生自发辐射.

1.8　光子衰变

题 1.8　一个 γ 光子在经过一个原子核 N 附近时，有可能衰变成为正负电子对 $\gamma+\mathrm{N}\to\mathrm{N}+e^++e^-$，试求该光子的能量下限和波长上限.

解　γ 光子的能量下限为

$$E_{\min}=2m_ec^2=2\times0.511\mathrm{MeV}=1.022\ \mathrm{MeV}$$

其波长上限为

$$\lambda_{\max}=\frac{hc}{E_{\min}}=\frac{1.241\times10^4}{1.022\times10^6}\ \text{Å}=0.012\ \text{Å}$$

上面过程的逆过程 $\mathrm{N}+e^++e^-\to\gamma+\mathrm{N}$ 也可能发生，正负电子对湮灭，产生一个光子，但是这个过程发生的概率很小.

1.9　电子偶素的衰变

题 1.9　电子偶素 (e^+,e^-) 是由正负电子对形成的一个不稳定的束缚体系. 体系总自旋 $S=1$ 称为正电子偶素，其寿命是 $1.4\times10^{-7}\mathrm{s}$，湮灭表现为发射三个光子，体系总自旋 $S=0$ 的，称为仲电子偶素，其寿命为 $1.25\times10^{-10}\mathrm{s}$，湮灭转化为两个光子. 求过程 $e^+e^-\to2\gamma$ 产生的光子的最小能量.

解　由能量守恒定律

$$2m_ec^2=E_{\gamma1}+E_{\gamma2}$$

由动量守恒定律

$$0 = p_{\gamma 1} + p_{\gamma 2}$$

因为光量子能量 $E_\gamma = p_\gamma c$，解上面方程组得到

$$E_{\gamma 1} = E_{\gamma 2} = m_e c^2 = 0.511\,\text{MeV}$$

1.10 光波的反射与折射

题 1.10 (1) 试用 Fermat 最短光程定律导出光的折射定律 $n_1 \sin\alpha_1 = n_2 \sin\alpha_2$；(2) 光的波动说的拥护者曾经向光的微粒论者提出下列非难：如果认为光是"粒子"，则其运动遵守最小作用量原理 $\delta\int p\mathrm{d}l = 0$，若认为 $p = mv$，则 $\delta\int v\mathrm{d}l = 0$，$p$ 指"粒子"动量，v 指粒子"速度"．这样将导出下列折射定律 $n_1 \sin\alpha_2 = n_2 \sin\alpha_1$，这明显违反了实验事实. 即使考虑相对论效应，对于自由粒子，$p = \dfrac{Ev}{c^2}$ 仍然成立，E 是粒子能量，从一种介质到另一种介质，E 不改变，因此仍然得到 $\delta\int p\mathrm{d}l = 0$. 矛盾依然存在，你如何解决这个矛盾？

解 (1) 证明此处从略.

(2) 此论证存在两个错误：一是由于光子的静质量为零，因此光子没有与之相对应的经典粒子，光子的动量只能写为 $p = \dfrac{h}{\lambda}$；二是不能把粒子运动的速度 v 与光波在介质中的速度——相速 $u = \dfrac{c}{n}$ (n 为介质的折射率)混为一谈，此处认为 $v = u$ 是造成错误的根源.

解决上述矛盾的关键在于分清波包的相速 u、群速 v_g 以及粒子的运动速度 v 三个不同的概念，并找出其中的关系，再将光子的动量 $p = \dfrac{h}{\lambda}$ 代入最小作用量原理之中，即得出正确的折射定律.

定义波包的相速 u 为

$$u = \frac{\omega}{k}$$

波包的群速 v_g 为

$$v_g = \frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}$$

粒子的运动速度为

$$v = \frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}p}$$

因此，若波包的色散关系 $\omega(k)$ 是线性的，则 $u = v_g$；若色散关系 $\omega(k)$ 是非线性的，则 $u \neq v_g$；而对于自由运动的实物粒子来说，由于 $v = \dfrac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}p} = \dfrac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}p}$，则 de Broglie 波的群速 v_g 是相等的.

下面把上述的具体关系应用于光子与实物粒子身上.

对于光波而言，色散关系为

$$\omega(k)=\begin{cases} c_0 k & 真空 \\ \dfrac{c_0}{n}k & 介质 \end{cases}$$

式中：c_0是光速在真空中的传播速度. 色散关系均为线性关系，故

$$u=v_g$$

但光子的静质量$m_0=0$，没有与之相对应的经典粒子，其动量只能表示为

$$p=\frac{h}{\lambda} \tag{1}$$

其中λ为光波波长.

对于非相对论性自由粒子，由于$E=\dfrac{p^2}{2m}$，故相应的 de Broglie 波的色散关系为

$$\omega=\frac{\hbar}{2m}k^2$$

是非线性关系，故

$$u\neq v_g=v$$

即使是相对论性自由粒子，由于$E=\left(m_0^2c^4+p^2c^2\right)^{\frac{1}{2}}$，相应的 de Broglie 波的色散关系为

$$\omega=\left(\frac{m_0^2c^2}{\hbar^2}+k^2\right)^{\frac{1}{2}}c$$

仍为非线性关系，故仍有

$$u\neq v_g=v$$

在题述论证中，错误地认为粒子运动的速度v总是与相应的 de Broglie 波的相速u相等，才导致了错误的折射定律.

正确的解释为：若将光子看作"粒子"，则应遵守最小作用量原理

$$\delta\int p\mathrm{d}l=0 \tag{2}$$

再将式(1)代入式(2)，可得

$$\delta\int p\mathrm{d}l=\delta\int\frac{h}{\lambda}\mathrm{d}l=0 \tag{3}$$

而介质中光波的波长λ与介质折射率n之间的关系

$$\lambda=\frac{\lambda_0}{n} \tag{4}$$

式中：λ_0为光在真空中的波长. 将式(4)代入式(3)中，可得

$$0=\delta\int\frac{h}{\lambda_0/n}\mathrm{d}l=\frac{h}{\lambda_0}\delta\int n\mathrm{d}l$$

即

$$\delta\int n\mathrm{d}l=0$$

此即 Fermat 原理. 由此必有

$$n_1 \sin\alpha_1 = n_2 \sin\alpha_2$$

1.11 de Broglie 波的相速与群速

题 1.11 试确定与 de Broglie 波长 $\lambda = \dfrac{h}{p}$ 相应的波的相速度 u_p 和群速度 v_g.

解 (1) 求相速：由 $E = mc^2 = h\nu$ 可知 $\nu = \dfrac{mc^2}{h}$，又因为 $\lambda = \dfrac{h}{p} = \dfrac{h}{mv}$，所以

$$u_p = \frac{\omega}{k} = \frac{2\pi\nu}{2\pi/\lambda} = \nu\lambda = \frac{mc^2}{h} \cdot \frac{h}{mv} = \frac{c^2}{v} > c$$

(2) 求群速：由定义 $v_g = \dfrac{d\omega}{dk} = \dfrac{d(2\pi\nu)}{d(2\pi/\lambda)} = \dfrac{d\nu}{d(1/\lambda)}$ 及 $\nu = \dfrac{mc^2}{h}$、$\lambda = \dfrac{h}{p} = \dfrac{h}{mv}$ 可得

$$v_g = c^2 \frac{dm}{dp}$$

通过相对论的能量-动量关系 $E^2 = m^2c^4 = p^2c^2 + m_0{}^2c^4$，两边微分可知

$$c^2 m dm = p dp$$

由此可得

$$v_g = c^2 \frac{dm}{dp} = \frac{p}{m} = v$$

因此，和一个运动粒子相伴随的 de Broglie 波是用与之联系的由无数平面波叠加而成的一个波包来描述的. 每一个平面波都以相速度运动，相速度可以超过光速. 但是单个的相速度是观测不到的，可观测的量是局部扰动的速度，即群速度，这个速度即是通常所说的粒子的速度，它总小于光速.

1.12 考虑相对论修正后电子的 de Broglie 波长

题 1.12 电子被加速后的速度很大，必须考虑相对论修正，则原来 $\lambda = \dfrac{12.25}{\sqrt{V}}$ Å 的电子的 de Broglie 波长与加速电压 V 的关系式应改为

$$\lambda = \frac{12.25}{\sqrt{V}}(1 - 0.489 \times 10^{-6})\,\text{Å}$$

式中：V 为以伏特为单位的电子加速电压. 试证明之.

证明 在非相对论情况下，电子若被电势差为 V 的电场加速，则 de Broglie 波长为

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \frac{h}{\sqrt{2meV}} \approx \frac{12.25}{\sqrt{V}}\,\text{Å}$$

考虑相对论效应后，由能量-动量关系式

$$E^2 = (K + m_0c^2)^2 = (pc)^2 + (m_0c^2)^2$$

式中：$K = eV$ 为电子的动能；m_0 为电子的静质量，有

$$pc=\left[2m_0c^2K\left(1+\frac{K}{2m_0c^2}\right)\right]^{1/2}$$

所以

$$\lambda=\frac{h}{p}=\frac{hc}{pc}=\frac{h}{\sqrt{2m_0eV}}\cdot\left(1+\frac{eV}{2m_0c^2}\right)^{-1/2}$$

$$=\frac{12.25}{\sqrt{V}}\cdot\left(1+\frac{eV}{2m_0c^2}\right)^{-1/2} \tag{1}$$

因为 $\frac{eV}{2m_0c^2}\ll 1$，可将式(1)中的 $\left(1+\frac{eV}{2m_0c^2}\right)^{-1/2}$ 用二项式定理展开，只取前 2 项得

$$\left(1+\frac{eV}{2m_0c^2}\right)^{-1/2}\approx 1-\frac{eV}{4m_0c^2}$$

再代入式(1)，即得

$$\lambda\approx\frac{12.25}{\sqrt{V}}\left(1-\frac{eV}{4m_0c^2}\right)=\frac{12.25}{\sqrt{V}}(1-0.489\times10^{-6}V)\,\text{Å}$$

1.13　de Broglie 波长的计算

题 1.13　(1) 试求质量为 0.01kg，速度为 10m/s 的一个小球的 de Broglie 波波长；(2) 经过 10 000V 电压加速的电子的 de Broglie 波长；(3) 经过 10 000V 电压加速的质子的 de Broglie 波长；(4) 试计算 0.05eV 中子的 de Broglie 波长.

解　(1) $\lambda=\frac{h}{p}=\frac{h}{mv}\approx 6.63\times10^{-33}\,\text{m}=6.63\times10^{-23}\,\text{Å}$，这说明：实物粒子的 de Broglie 波长太小，宏观世界中的任何物体的线度都比它大得多，故难以观测到实物粒子的波动性.

(2) $\lambda_e=\frac{h}{p_e}=\frac{h}{\sqrt{2m_eE}}=\frac{h}{\sqrt{2m_eeV}}\approx 0.12\times10^{-10}\,\text{m}=0.12\,\text{Å}$，这表明电子的 de Broglie 波长能与晶体的原子间距相比拟，故晶体的电子衍射试验能够显示电子的波长.

(3) 质子的静质量为

$$m_pc^2\approx 9.39\times10^8\,\text{eV}$$

当质子获得 10^4eV 的动能时，相应的 de Broglie 波长可用非相对论性关系式得出

$$\lambda_p=\frac{h}{\sqrt{2m_peV}}\approx 2.9\times10^{-13}\,\text{m}=0.0029\,\text{Å}$$

(4) 由于中子的动能远小于它的静动能，故可以利用非相对论性关系式计算

$$\lambda_n=\frac{h}{\sqrt{2m_nE_k}}\approx 1.28\times10^{-10}\,\text{m}=1.28\,\text{Å}$$

式中：m_n 为中子的质量；E_k 为其动能. 数量级为 1Å 的这种常用波长在慢中子物理中用起

来非常方便.

1.14　电子显微镜的分辨率

题 1.14　如果我们需要观测一个大小为2.5Å的物体,可用的光子的最小能量是多少?若把光子改为电子呢?

解　为了发生散射，光波的波长必须与所观测物体的大小同数量级或者更小. 所以，在这个问题中我们能够采用的光的最大波长 $\lambda = 2.5\,\text{Å}$，这样相应的光子的最小能量就为

$$E_{\min} = h\nu_{\min} = \frac{hc}{\lambda_{\max}} \approx 4.96\times 10^3\,\text{eV}$$

若把光子改为电子，则最大电子的波长 $\lambda'_{\max} = 2.5\,\text{Å}$，按照非相对论性计算

$$p = \sqrt{2m_e E}$$

因此

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_e E_\text{k}}}$$

则

$$E_\text{k} = \frac{h^2}{2m_e\lambda_{\max}^2} \approx 24.1\,\text{eV}$$

由此可以看出，对于给定的能量，电子具有比光子高得多的分辨率. 正因为如此，电子显微镜能够有比光学显微镜更高的放大率.

1.15　波函数的归一化

题 1.15　讨论以下波函数的归一化问题:

(1) 粒子在一维无限深势阱中运动,设 $\psi(x) = A\sin\frac{\pi x}{a}\,(0 \leqslant x \leqslant a)$,求 A 使波函数归一. (2) 设 $\psi(x) = A\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2\right)$，$\alpha$ 为已知常数，求归一化常数 A. (3) 设 $\psi(x) = \exp(\mathrm{i}kx)$，粒子的位置概率分布如何？能否归一？(4) 设 $\psi(x) = \delta(x)$，粒子的位置概率分布如何？能否归一？

解　(1) 由于在全空间(一维)发现粒子的概率为 1，应有

$$\int \psi^*(x)\psi(x)\mathrm{d}x = \int_0^a |A|^2\left(\sin\frac{\pi x}{a}\right)^2 \mathrm{d}x = 1$$

由此可得 $|A| = \sqrt{\frac{2}{a}}$.

(2) 同理，有

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|A|^2\exp(-\alpha^2x^2)\mathrm{d}x=1$$

得 $|A|=\sqrt[4]{\dfrac{\alpha^2}{\pi}}$.

(3) 概率密度 $P(x)=\mathrm{e}^{-ikx}\mathrm{e}^{ikx}=1$，即在空间中任何位置，单位体积内测到一个粒子的概率为 1.

若沿用上面的方法来求归一化系数，则会出现

$$\int_{-\infty}^{\infty}|A|^2\mathrm{e}^{-ikx}\mathrm{e}^{ikx}\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{\infty}|A|^2\mathrm{d}x=\infty\cdot|A|^2$$

要使积分为 1，必须 $A=0$. 因此波函数不能归一，只能归于 δ 函数

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{2\pi}\exp(-\mathrm{i}k'x)\exp(\mathrm{i}kx)\mathrm{d}x=\delta(k-k')$$

(4) $\psi(x)=\delta(x-x_0)$ 是粒子的位置本征函数，此波函数描述的粒子的位置概率分布为

$$P(x)=\left|\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x'-x_0)\delta(x-x')\mathrm{d}x'\right|^2=\delta^2(x-x_0)$$

即在 $x=x_0$ 处可测得粒子，在其他位置测不到粒子. 位置本征函数不能归一，只能归到 δ 函数

$$\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-x_1)\delta(x-x_2)\mathrm{d}x=\delta(x_1-x_2)$$

1.16 粒子的径向分布与角分布

题 1.16 设在球坐标中，粒子波函数为 $\psi(r,\theta,\varphi)$ ，试求：(1) 在球壳 $(r,r+\mathrm{d}r)$ 中找到粒子的概率；(2) 在 (θ,φ) 方向的立体角 $\mathrm{d}\Omega$ 中找到粒子的概率.

解 (1) 在球壳 $(r,r+\mathrm{d}r)$ 中找到粒子的概率为

$$P(r)\mathrm{d}r=\left(\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}|\psi(r,\theta,\varphi)|^2\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi\right)r^2\mathrm{d}r$$

(2) 在 (θ,φ) 方向的立体角 $\mathrm{d}\Omega$ 中找到粒子的概率为

$$P(\theta,\varphi)\mathrm{d}\Omega=\left(\int_0^{\infty}|\psi(r,\theta,\varphi)|^2r^2\mathrm{d}r\right)\mathrm{d}\Omega$$

1.17 验证不确定性关系

题 1.17 对下列波函数所描述的粒子，分别求出位置和动量的不确定度，并验证不确定性关系：(1) 平面波 $\psi(x)=\exp(\mathrm{i}kx)$ ；(2) $\psi(x)=\delta(x-x_0)$ ；(3) Gauss 型波包 $\psi(x)=\sqrt[4]{\dfrac{\alpha^2}{\pi}}\exp\left(-\dfrac{1}{2}\alpha^2x^2\right)$；(4) $\psi(x)=\dfrac{1}{\sqrt{L}}\exp\left(-\dfrac{|x|}{L}\right)$.

解 (1) 算符 Ω 在某一量子态 ψ 下的不确定度为

$$\Delta_\psi \Omega = \sqrt{\left\langle \Omega^2 \right\rangle_\psi - \left\langle \Omega \right\rangle_\psi^2}$$

式中：$\left\langle \Omega \right\rangle_\psi = \int \psi^*(x)\Omega\psi(x)\mathrm{d}x$.

算符Ω_1, Ω_2之间的不确定性关系满足

$$(\Delta_\psi \Omega_1)(\Delta_\psi \Omega_2) \geqslant \left| \frac{1}{2} \left\langle [\Omega_1, \Omega_2] \right\rangle_\psi \right|$$

平面波e^{ikx}是动量$\hat{p} = \hbar\hat{k}$的本征态，此波函数描述的粒子具有确定的动量p，所以动量的平均值也为p，均方偏差$\Delta_\psi \hat{p} = 0$.

再计算$\left\langle \hat{x} \right\rangle_\psi$、$\left\langle \hat{x}^2 \right\rangle_\psi$，易得

$$\left\langle \hat{x} \right\rangle_\psi = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-ikx} x \mathrm{e}^{ikx} \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} x \mathrm{d}x = 0$$

$$\left\langle \hat{x}^2 \right\rangle_\psi = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-ikx} x^2 \mathrm{e}^{ikx} \mathrm{d}x = \infty$$

故有$\Delta_\psi \hat{x} = \infty$.

综上所述，仍可以认为满足

$$(\Delta_\psi \hat{x})(\Delta_\psi \hat{p}) \geqslant \left| \frac{1}{2} \left\langle [\hat{x}, \hat{p}] \right\rangle_\psi \right| = \frac{1}{2}\hbar$$

(2) 与(1)类似，$\delta(x - x_0)$是位置算符的本征态，其本征值为x_0，处于这种量子态的粒子具有确定的位置x_0，所以有$\Delta_\psi \hat{x} = 0$. 对于$\left\langle \hat{p} \right\rangle_\psi$，可转到动量空间求解

$$\psi(k) = \int \delta(x - x_0) \mathrm{e}^{ikx} \mathrm{d}x = \mathrm{e}^{ikx_0}$$

利用奇函数的性质，可求得

$$\left\langle \hat{p} \right\rangle_\psi = 0, \quad \left\langle \hat{p}^2 \right\rangle_\psi = \int \mathrm{e}^{-ikx_0} \hat{p}^2 \mathrm{e}^{ikx_0} \mathrm{d}p = \infty$$

故$\Delta_\psi \hat{p} = \infty$，因此满足$(\Delta_\psi \hat{x})(\Delta_\psi \hat{p}) \geqslant \frac{1}{2}\hbar$.

注意　动量本征态与位置本征态是两种理想极限，是真实的物理波包无限展宽和无限压缩的两种极限结果. 它们是很有用的概念，但并非物理上真实的量子状态.

(3) 因为$\left\langle \hat{x} \right\rangle_\psi$、$\left\langle \hat{p} \right\rangle_\psi$的积分式中被积函数为奇函数，故在$-\infty \sim \infty$范围内的积分为零. 另外易求出$\left\langle \hat{x}^2 \right\rangle_\psi$、$\left\langle \hat{p}^2 \right\rangle_\psi$，即

$$\left\langle \hat{x}^2 \right\rangle_\psi = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int \mathrm{e}^{-\alpha^2 x^2} x^2 \mathrm{d}x = \frac{1}{2\alpha^2}$$

$$\left\langle \hat{p}^2 \right\rangle_\psi = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int \mathrm{e}^{-\alpha^2 x^2/2} \left(-\hbar^2 \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} \right) \mathrm{e}^{-\alpha^2 x^2/2} \mathrm{d}x = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2}$$

所以有$(\Delta_\psi \hat{x})(\Delta_\psi \hat{p}) = \frac{\hbar}{2}$. 因此称$\psi(x) = \sqrt[4]{\frac{\alpha^2}{\pi}} \mathrm{e}^{-\alpha^2 x^2/2}$为最小不确定波包.

(4) 同样因为被积函数为奇函数积分，易算出$\left\langle \hat{x} \right\rangle_\psi = 0$

$$\left\langle \hat{x}^2 \right\rangle_\psi = \frac{2}{L}\int_0^\infty e^{-2x/L}x^2 dx = \frac{L^2}{2}$$

故有 $\Delta_\psi \hat{x} = \dfrac{L}{\sqrt{2}}$，下面求 $\Delta_\psi \hat{p}$.

因为 $\dfrac{\partial}{\partial x}e^{-|x|/L} = \left[\dfrac{1}{L} - \dfrac{2}{L}\theta(x)\right]e^{-|x|/L}$，其中

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}$$

为阶梯函数，故有

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}e^{-|x|/L} = -\frac{2}{L}\delta(x)e^{-|x|/L} + \frac{1}{L^2}e^{-|x|/L}$$

因此

$$\begin{aligned} \left\langle \hat{p} \right\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{L}}e^{-|x|/L}\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right]\frac{1}{\sqrt{L}}e^{-|x|/L}dx \\ &= -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{L}e^{-|x|/L}\left[\frac{1}{L} - \frac{2}{L}\theta(x)\right]e^{-|x|/L}dx = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left\langle \hat{p}^2 \right\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{L}e^{-|x|/L}\left(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)e^{-|x|/L}dx \\ &= -\hbar^2\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{L}\left[\frac{2}{L}\delta(x) - \frac{1}{L^2}\right]e^{-2|x|/L}dx \\ &= \frac{2\hbar^2}{L}|\psi(0)|^2 - \frac{\hbar^2}{L^2} = \frac{\hbar^2}{L^2} \end{aligned}$$

$$\Delta_\psi \hat{p} = \frac{\hbar}{L}$$

也可以转到动量空间求解

$$\begin{aligned} \psi(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar L}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-|x|/L}e^{-ipx/\hbar}dx = \frac{2}{\sqrt{2\pi\hbar L}}\int_0^\infty e^{-x/L}\cos\left(\frac{p}{\hbar}x\right)dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar L}}\cdot\frac{2/L}{p^2/\hbar^2 + 1/L^2} \end{aligned}$$

$$\left\langle \hat{p}^2 \right\rangle_\psi = \frac{1}{2\pi\hbar L}\int_0^\infty\left(\frac{2/L}{p^2/\hbar^2 + 1/L^2}\right)^2 p^2 dp = \frac{\hbar^2}{L^2}$$

上面利用了积分公式

$$\int\frac{dx}{(a^2+x^2)^n} = \begin{cases} \dfrac{1}{a}\arctan\dfrac{x}{a}, & n = 1 \\ \dfrac{x}{2(n-1)a^2(a^2+x^2)^{n-1}} + \dfrac{2n-3}{2(n-1)a^2}\displaystyle\int\frac{dx}{(a^2+x^2)^{n-1}}, & n > 1 \end{cases}$$

由上面计算可知$(\Delta_\psi \hat{x})(\Delta_\psi \hat{p})=\dfrac{\hbar}{\sqrt{2}}>\dfrac{\hbar}{2}$.

1.18 利用不确定性关系，估计无限深方势阱中的粒子的基态能量

题 1.18 利用不确定性关系估计无限深方势阱中粒子的基态能量，设阱宽为a.

解 因为对基态波函数有$\bar{x}=\bar{p}=0$，故$\Delta x\sim a,\Delta p\sim p$，代入不确定性关系

$$\Delta p\cdot\Delta x\geqslant\frac{\hbar}{2}$$

给出$p\geqslant\dfrac{\hbar}{2a}$，因此基态能量为

$$E_0=\frac{p^2}{2m}\sim\frac{\hbar^2}{8ma^2}$$

1.19 波函数的归一化及$\overline{x^2}$、$\overline{p^2}$的计算

题 1.19 一维运动的粒子处于状态$\psi(x)=\begin{cases}Axe^{-\lambda x}, & x\geqslant 0\\ 0, & x<0\end{cases}$上，其中$\lambda>0$，$A$为待求的归一化常数，求：(1) 粒子坐标的概率分布函数；(2) 粒子坐标的平均值$\bar{x}$和粒子坐标平方的平均值$\overline{x^2}$；(3) 粒子动量的概率分布函数；(4) 粒子动量的平均值$\bar{p}$和粒子动量平方的平均值$\overline{p^2}$；(5) 验证不确定性关系$\overline{\Delta x^2}\cdot\overline{\Delta p^2}\geqslant\dfrac{\hbar^2}{4}$.

解 先对态$\psi(x)$进行归一化. 由波函数的归一化条件

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x)|^2\,dx=1$$

有

$$\int_0^{\infty}|A|^2x^2e^{-2\lambda x}dx=\frac{|A|^2}{4\lambda^3}=1$$

得

$$A=2\lambda^{3/2}$$

于是

$$\psi(x)=\begin{cases}2\lambda^{3/2}xe^{-\lambda x}, & x\geqslant 0\\ 0, & x<0\end{cases}$$

(1) 粒子坐标的概率分布函数为

$$\rho(x)=|\psi(x)|^2=\begin{cases}4\lambda^3x^2e^{-2\lambda x}, & x\geqslant 0\\ 0, & x<0\end{cases}$$

(2) 坐标的平均值为

$$\bar{x}=\int_{-\infty}^{\infty}x\rho(x)dx=\int_0^{\infty}4\lambda^3x^3e^{-2\lambda x}dx=\frac{3}{2\lambda}$$

坐标平方的平均值为

$$\overline{x^2}=\int_{-\infty}^{\infty}x^2\rho(x)\mathrm{d}x=\int_0^{\infty}4\lambda^3x^4\mathrm{e}^{-2\lambda x}\mathrm{d}x=\frac{3}{\lambda^2}$$

(3) 粒子动量的概率分布函数. 因为

$$c(p)=(2\pi\hbar)^{-1/2}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{d}x=2\lambda^{3/2}(2\pi\hbar)^{-1/2}\int_0^{\infty}x\mathrm{e}^{-(\lambda+\mathrm{i}p/\hbar)x}\mathrm{d}x$$

$$=2\lambda^{3/2}(2\pi\hbar)^{-1/2}\left(\lambda+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p\right)^{-2}$$

所以

$$|c(p)|^2=\frac{2\lambda^3\hbar^3}{\pi(\lambda^2\hbar^2+p^2)^2}$$

(4) 动量的平均值为

$$\overline{p}=\int_{-\infty}^{\infty}p|c(p)|^2\mathrm{d}p=\frac{2\lambda^3\hbar^3}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{p}{(\lambda^2\hbar^2+p^2)^2}\mathrm{d}p=-\frac{\lambda^3\hbar^3}{\pi(\lambda^2\hbar^2+p^2)}\bigg|_{-\infty}^{\infty}=0$$

动量平方的平均值为

$$\overline{p^2}=\int_{-\infty}^{\infty}p^2|c(p)|^2\mathrm{d}p=\frac{2\lambda^3\hbar^3}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{p^2}{(\lambda^2\hbar^2+p^2)^2}\mathrm{d}p=\lambda^2\hbar^2$$

(5) 不确定性关系为

$$(\Delta\hat{x})^2(\Delta\hat{p})^2=\left(\overline{x^2}-\overline{x}^2\right)\left(\overline{p^2}-\overline{p}^2\right)=\left[\frac{3}{\lambda^2}-\left(\frac{3}{2\lambda}\right)^2\right]\lambda^2\hbar^2=\frac{3}{4}\hbar^2>\frac{\hbar^2}{4}$$

1.20 自由粒子动量和动能平均值的计算

题 1.20 设 $t=0$ 时的粒子的状态为 $\psi(x)=A\left(\sin^2kx+\frac{1}{2}\cos kx\right)$，求此时粒子的平均动量和平均动能.

解 此题不能直接套用动量的平均值公式计算

$$\overline{p}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\hat{p}\psi(x)\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\left(\frac{h}{\mathrm{i}}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\psi(x)\mathrm{d}x \tag{1}$$

因为式(1)的适用条件要求体系的状态波函数必须是平方可积的，即要求

$$\psi(x)\xrightarrow{|x|\to\infty}0 \tag{2}$$

而题给出的态显然不满足条件(2)，故不能直接用式(1)计算. 此题可用如下两种解法求解.

解法一 利用三角函数公式

$$\sin kx=\frac{1}{2\mathrm{i}}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}),\qquad \cos kx=\frac{1}{2}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx})$$

可得

$$\psi(x)=A\left(\sin^2 kx+\frac{1}{2}\cos kx\right)=\frac{A}{4}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}2kx}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2kx}+2)$$

$$=\frac{A}{4}(2\pi\hbar)^{1/2}\left[(2\pi\hbar)^{-1/2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_1x}+(2\pi\hbar)^{-1/2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_2x}-(2\pi\hbar)^{-1/2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_3x}\right.$$

$$\left.-(2\pi\hbar)^{-1/2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_4x}+2(2\pi\hbar)^{-1/2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_5x}\right] \tag{3}$$

式(3)表明粒子所处的状态实际上是由 5 个平面波线性叠加而成的叠加态，根据叠加态原理，此时粒子动量有 5 个可取值，它们的取值及相应的概率分别为

$$\left.\begin{aligned}
&p_1=\hbar k, && \omega_1=\left|\frac{A}{4}\sqrt{2\pi\hbar}\right|^2=\frac{\pi\hbar}{8}|A|^2\\
&p_2=-\hbar k, && \omega_2=\left|\frac{A}{4}\sqrt{2\pi\hbar}\right|^2=\frac{\pi\hbar}{8}|A|^2\\
&p_3=2\hbar k, && \omega_3=\left|-\frac{A}{4}\sqrt{2\pi\hbar}\right|^2=\frac{\pi\hbar}{8}|A|^2\\
&p_4=-2\hbar k, && \omega_4=\left|-\frac{A}{4}\sqrt{2\pi\hbar}\right|^2=\frac{\pi\hbar}{8}|A|^2\\
&p_5=0, && \omega_5=\left|\frac{A}{2}\sqrt{2\pi\hbar}\right|^2=\frac{\pi\hbar}{2}|A|^2
\end{aligned}\right\} \tag{4}$$

由此可得粒子的动量与动能的平均值分别为

$$\overline{p}=\frac{\sum\limits_{i=1}^{5}p_i\omega_i}{\sum\limits_{i=1}^{5}\omega_i}=0$$

$$\overline{T}=\frac{1}{2m}\overline{p^2}=\frac{1}{2m}\cdot\frac{\sum\limits_{i=1}^{5}p_i\omega_i}{\sum\limits_{i=1}^{5}\omega_i}=\frac{5k^2\hbar^2|A|^2}{8m|A|^2}=\frac{5k^2\hbar^2}{8m}$$

再由波函数的归一化条件，即在态 $\psi(x)$ 中，粒子动量取各可能值的概率和必须等于 1，有

$$\sum_{i=1}^{5}\omega_i=\pi\hbar|A|^2=1,\qquad A=(\pi\hbar)^{-1/2}$$

解法二　将已知态 $\psi(x)$ 作 Fourier 展开

$$\psi(x)=\int_{-\infty}^{\infty}c(p)(2\pi\hbar)^{-1/2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{d}p \tag{5}$$

则式(5)的 Fourier 逆变换为

$$c(p)=(2\pi\hbar)^{-1/2}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{d}x \tag{6}$$

把式(3)代入式(6)，有

$$c(p)=\frac{A}{4\sqrt{2\pi\hbar}}\left[\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_1-p)\frac{x}{\hbar}}\mathrm{d}x+\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_2-p)\frac{x}{\hbar}}\mathrm{d}x-\int\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_3-p)\frac{x}{\hbar}}\mathrm{d}x\right.$$

$$\left.-\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_4-p)\frac{x}{\hbar}}\mathrm{d}x+2\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_5-p)\frac{x}{\hbar}}\mathrm{d}x\right]$$

由 δ 函数的定义 $\delta(p'-p)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'-p)x}\mathrm{d}x$ 得

$$c(p)=\frac{A}{4\sqrt{2\pi\hbar}}[2\pi\hbar\delta(p_1-p)+2\pi\hbar\delta(p_2-p)-2\pi\hbar\delta(p_3-p)$$

$$-2\pi\hbar\delta(p_4-p)+4\pi\delta(p_5-p)]$$

再根据 δ 函数的性质 $\delta(p'-p)=\begin{cases}\infty, & p=p'\\ 0, & p\neq p'\end{cases}$，可知粒子的动量有 5 个可能的取值且相应的概率为

$$\left.\begin{aligned}
&p_1=\hbar k, && \omega_1=|c(p_1)|^2=\left|\frac{A}{4}\sqrt{2\pi\hbar}\right|^2=\frac{\pi\hbar}{8}|A|^2\\
&p_2=-\hbar k, && \omega_2=|c(p_2)|^2=\left|\frac{A}{4}\sqrt{2\pi\hbar}\right|^2=\frac{\pi\hbar}{8}|A|^2\\
&p_3=2\hbar k, && \omega_3=|c(p_3)|^3=\left|-\frac{A}{4}\sqrt{2\pi\hbar}\right|^2=\frac{\pi\hbar}{8}|A|^2\\
&p_4=-2\hbar k, && \omega_4=|c(p_4)|^2=\left|-\frac{A}{4}\sqrt{2\pi\hbar}\right|^2=\frac{\pi\hbar}{8}|A|^2\\
&p_5=0, && \omega_5=|c(p_5)|^2=\left|\frac{A}{2}\sqrt{2\pi\hbar}\right|^2=\frac{\pi\hbar}{2}|A|^2
\end{aligned}\right\}$$

这与式(4)的结果一致.

1.21 流密度算符

题 1.21 证明流密度算符

$$\hat{\boldsymbol{j}}=\frac{1}{2}\left[\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{m}+\frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{m}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\right]$$

是 Hermite 算符，并求它在 $\psi(\boldsymbol{r})$ 态中的平均值表达式.

解 由 Hermite 算符的定义可知，当算符 $\hat{A}$ 满足下列关系式时为 Hermite 算符

$$\int \psi^*(\boldsymbol{r})\hat{A}\varphi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r} = \int \varphi(\boldsymbol{r})\left[\hat{A}\psi(\boldsymbol{r})\right]^* \mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

式中：$\psi(\boldsymbol{r}), \varphi(\boldsymbol{r})$ 为两个任意波函数.

现将 $\hat{j}$ 代替上式中的 $\hat{A}$，并将 $\hat{p} = -\mathrm{i}\hbar\nabla$ 代入，这时等式左边为

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\boldsymbol{r})\frac{1}{2}\left[\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\frac{-\mathrm{i}\hbar\nabla}{m} + \frac{-\mathrm{i}\hbar\nabla}{m}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\right]\varphi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

$$= \oiint_{\infty} \psi^*(\boldsymbol{r})\left[\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\left(\frac{-\mathrm{i}\hbar}{m}\right)\varphi(\boldsymbol{r})\right]\mathrm{d}\boldsymbol{S}$$

$$+ \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\boldsymbol{r})\frac{1}{2}\left[\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\frac{\mathrm{i}\hbar\nabla}{m} + \frac{\mathrm{i}\hbar\nabla}{m}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\right]\psi^*(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

上式右边第一项面积分因 $\boldsymbol{r}'$ 不在积分面上而消失，第二项正好是 $\int \varphi(\boldsymbol{r})\left[\hat{j}\psi(\boldsymbol{r})\right]^* \mathrm{d}\boldsymbol{r}$，故 $\hat{j}$ 为 Hermite 算符.

上面用到了矢量微分公式

$$\psi^*(\boldsymbol{r})\nabla\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\varphi(\boldsymbol{r}) = \nabla\left[\psi^*(\boldsymbol{r})\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\varphi(\boldsymbol{r})\right] - \left[\nabla\psi^*(\boldsymbol{r})\right]\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\varphi(\boldsymbol{r})$$

以及

$$\psi^*(\boldsymbol{r})\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\nabla\varphi(\boldsymbol{r}) = \nabla\left[\psi^*(\boldsymbol{r})\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\varphi(\boldsymbol{r})\right] - \left[\nabla\psi^*(\boldsymbol{r})\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\right]\varphi(\boldsymbol{r})$$

同理可证

$$\langle\hat{j}\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\boldsymbol{r}')\hat{j}\psi(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}' = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left[\psi^*(\boldsymbol{r})\nabla\psi(\boldsymbol{r}) - \psi(\boldsymbol{r})\nabla\psi^*(\boldsymbol{r})\right]$$

1.22 电子 Young 双缝实验与测量公设

题 1.22 结合电子 Young 双缝实验中，电子被接受屏与控测器探测前后的实验测量过程，解释量子力学第三公设——测量公设中三个阶段的说法.

解 设双缝屏上有 A，B 两条缝，通过双缝之后的电子状态可表示为

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = \psi_{\mathrm{A}}(\boldsymbol{r},t) + \psi_{\mathrm{B}}(\boldsymbol{r},t)$$

这说明电子的量子态在经过双缝仪器时，和仪器由两条缝所表示的两个可区分态构成了纠缠态. 当我们要测量电子从哪条缝经过时，则测量结果一定是塌缩到和某一条缝纠缠的对应的态($\psi_{\mathrm{A}}(\boldsymbol{r},t)$或者 $\psi_{\mathrm{B}}(\boldsymbol{r},t)$). 当不测量时，则处于叠加态，于是可以认为当不可区分时，电子是同时通过两条缝. 在电子到达接收屏时 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 可以分解为与接收屏位置可区分态相纠缠的电子位置本征态的叠加

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = \iiint \psi(\boldsymbol{r}',t)\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}'$$

式中：$\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r})$ 是位置本征值为 $\boldsymbol{r}'$ 的本征态. 当在接收屏上 $\boldsymbol{r}'$ 位置发现电子时，即已经以 $|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2$ 的概率塌缩到 $\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ 态，然后以此为初态在接收屏新环境的新 Hamilton 量下继续演化.

1.23　测量公设例(1)

题 1.23　测量公设：可观测算符 $\hat{A},\hat{B}$ 本征值分别为 a_n,b_n，在任一态 $|\psi\rangle$ 中，先测得 $\hat{A}$ 的值 a_n，再测 $\hat{B}$ 值 b_n 的概率为 $P(a_n,b_n)$；而先测 $\hat{B}$ 值为 b_n，再测 $\hat{A}$ 值 a_n 的概率为 $P(b_n,a_n)$，问：$P(a_n,b_n)=P(b_n,a_n)$ 的条件如何？

解　$|\psi\rangle=\sum\limits_n c_n|a_n\rangle$，其中在 $|\psi\rangle$ 态下测量 $\hat{A}$ 得到结果为 a_n 的概率为 $|c_n|^2=|\langle a_n|\psi\rangle|^2$，在 $|\psi\rangle$ 态下测量 $\hat{A}$ 得到 a_n 后，体系由 $|\psi\rangle$ 态塌缩为 $|a_n\rangle$ 态，在 $|a_n\rangle$ 态下测量 $\hat{B}$ 值为 b_n 的概率为 $|\langle b_n|a_n\rangle|^2$.

故在态 $|\psi\rangle$ 下，先测 $\hat{A}$ 得 a_n，再测 $\hat{B}$ 得 b_n 的概率为

$$P(a_n,b_n)=|\langle a_n|\psi\rangle|^2|\langle b_n|a_n\rangle|^2 \tag{1}$$

同理，在态 $|\psi\rangle$ 下，先测 $\hat{B}$ 得 b_n，再测 $\hat{A}$ 得 a_n 的概率为

$$P(b_n,a_n)=|\langle b_n|\psi\rangle|^2|\langle a_n|b_n\rangle|^2 \tag{2}$$

若 $P(a_n,b_n)=P(b_n,a_n)$ 对所有 n 都成立，由式(1)和式(2)知

$$|\langle a_n|\psi\rangle|^2=|\langle b_n|\psi\rangle|^2 \tag{3}$$

由态 $|\psi\rangle$ 的任意性，式(3)对一切 n 成立必有

$$|a_n\rangle=|b_n\rangle$$

故 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 有共同的本征函数系为 $P(a_n,b_n)=P(b_n,a_n)$ 的条件.

1.24　测量公设例(2)

题 1.24　一体系 Hamilton 量 H 与时间无关，而 H 由非简并本征值 $h\nu$ 对应本征矢 $|\nu\rangle$，$\hat{H}|\nu\rangle=\hbar\omega|\nu\rangle$，可观测量 A 在同一 Hilbert 空间中，同样地用非简并本征方程 $\hat{A}|n\rangle=a_n|n\rangle$ 来定义. (1) 设体系开始处于状态 $|\nu\rangle$，这时测量 $\hat{A}$，问 $\hat{A}$ 的期望值为何？这一测量给出 A 的值为 a_m 的概率为多少？(2) 如果测量值为 a_m，并且经过时间 t 后，再重复测量，问再次测得 a_m 的概率是多少？

解　(1) 在初态 $|\nu\rangle$ 中 $\hat{A}$ 的期待值为

$$\overline{A}=\langle\nu|\hat{A}|\nu\rangle=\sum_{mn}\langle\nu|m\rangle\langle m|\hat{A}|n\rangle\langle n|\nu\rangle=\sum_n|\langle\nu|n\rangle|^2a_n$$

因此第一次测量结果，发现 A 的值 a_m 的概率是

$$P_m=|\langle\nu|m\rangle|^2$$

(2) 后来，体系不再处于初态 $|\nu\rangle$，而是处于态 $|m\rangle$，其进一步演化由 Schrödinger 方程给出

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|t\rangle = \hat{H}|t\rangle \tag{1}$$

演化初态是$|m\rangle$，式(1)的解为

$$|t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|m\rangle = \sum_\mu e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\mu\rangle\langle\mu|m\rangle = \sum_\mu e^{-i\omega_\mu t}|\mu\rangle\langle\mu|m\rangle$$

t时刻，再次测得a_m的概率是

$$P_m' = |\langle m|t\rangle|^2 = \left|\sum_\mu e^{-i\omega_\mu t}|\langle\mu|m\rangle|^2\right|^2$$

1.25　测量公设例(3)

题 1.25　已知可观测量A的算符$\hat{A}$有两个本征函数Φ_1，Φ_2，本征值为a_1, a_2；观察量B的算符$\hat{B}$有两个本征态χ_1, χ_2，本征值为b_1, b_2. 两种本征态有如下关系

$$\Phi_1 = \frac{2\chi_1 + 3\chi_2}{\sqrt{13}}, \qquad \Phi_2 = \frac{3\chi_1 - 2\chi_2}{\sqrt{3}}$$

当测量$\hat{A}$后得到a_1，若再测量$\hat{B}$，以后再测量$\hat{A}$，证明第二次得到a_1的概率是$\frac{97}{169}$.

证明　测量$\hat{A}$得到a_1后，系统塌缩到Φ_1态. 由于

$$\Phi_1 = \frac{2\chi_1 + 3\chi_2}{\sqrt{13}}$$

所以再测量$\hat{B}$得到b_1的概率为$\frac{4}{13}$，得到b_2的概率为$\frac{9}{13}$，测量$\hat{B}$后系统的态将塌缩到χ_1态或χ_2态. 由上式与

$$\Phi_2 = \frac{3\chi_1 - 2\chi_2}{\sqrt{3}}$$

可得

$$\chi_1 = \frac{2\Phi_1 + 3\Phi_2}{\sqrt{13}}, \qquad \chi_2 = \frac{3\Phi_1 - 2\Phi_2}{\sqrt{13}}$$

因此，当系统处于χ_1态，测量$\hat{A}$得到a_1的概率为$\frac{4}{13}$，因而从最初的态Φ_1连续测量$\hat{B}, \hat{A}$获得b_1, a_1的概率为$\frac{4}{13}\times\frac{9}{13} = \frac{16}{169}$，类似从$\Phi_1$测量$\hat{B}, \hat{A}$获得$b_2, a_1$的概率为$\frac{9}{13}\times\frac{9}{13} = \frac{81}{169}$. 这样第二次测量$\hat{A}$获得$a_1$的总概率为$\frac{16}{169} + \frac{81}{169} = \frac{97}{169}$.

1.26　能量守恒

题 1.26　设粒子在势场$V(\boldsymbol{r})$中运动：(1) 证明其能量平均值为

$$E=\int d^3xW=\int d^3x\left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi+\psi^*V\psi\right)$$

W 称为能量密度；(2) 证明能量守恒公式 $\frac{\partial W}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{S}=0$，其中

$$\boldsymbol{S}=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\nabla\psi+\frac{\partial\psi}{\partial t}\nabla\psi^*\right)$$

证明　(1) 设粒子的波函数为 $\psi(\boldsymbol{r})$，则其能量平均值

$$E=\int d^3x\psi^*(\boldsymbol{r})\hat{H}\psi^*(\boldsymbol{r})=\int d^3x\psi^*(\boldsymbol{r})\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r})$$

$$=\int d^3x\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left[-\nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi)+\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi\right]+\psi^*V\psi\right\}$$

上式右边第一项，由 Gauss 定理

$$\iiint\nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi)d^3x=\oiint(\psi^*\nabla\psi)\cdot ds$$

可以化为面积分. 将束缚态边条件 $\psi|_{\pm\infty}=0,\ \nabla\psi|_{\pm\infty}=0$ 可知这项为零，所以

$$E=\int d^3x\left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi+\psi^*V\psi\right)$$

(2)
$$\frac{\partial W}{\partial t}=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\cdot\nabla\psi+\nabla\psi^*\cdot\nabla\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)+\frac{\partial\psi^*}{\partial t}V\psi+\psi^*V\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

$$\nabla\cdot\boldsymbol{S}=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\cdot\nabla\psi+\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\nabla^2\psi+\nabla\frac{\partial\psi}{\partial t}\cdot\nabla\psi^*+\frac{\partial\psi}{\partial t}\nabla^2\psi^*\right)$$

$$\frac{\partial W}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{S}=\frac{\partial\psi^*}{\partial t}V\psi+\psi^*V\frac{\partial\psi}{\partial t}-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\nabla^2\psi+\frac{\partial\psi}{\partial t}\nabla^2\psi^*\right)$$

$$=\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\hat{H}\psi+\frac{\partial\psi}{\partial t}\hat{H}\psi^*=\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\left(i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)+\frac{\partial\psi}{\partial t}\left(-i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right)=0$$

1.27　一维束缚态无简并

题 1.27　考虑任意势 $V(x)$ 的时间无关的一维 Schrödinger 方程，证明：如果一个解具有性质：当 $x\to\pm\infty$ 时 $\psi(x)\to 0$，则此解必然非简并，进而是实的，除了某一可能的相因子.

证明　用反证法. 设另一 $\phi(x)$ 满足同样的方程，且具有与 $\psi(x)$ 相同的能量 E，并有 $\lim\limits_{x\to\infty}\phi(x)\to 0$，则

$$\begin{cases}\dfrac{\psi''}{\psi}=-\dfrac{2m(E-V)}{\hbar^2}\\[2ex]\dfrac{\phi''}{\phi}=-\dfrac{2m(E-V)}{\hbar^2}\end{cases}$$

所以$\psi''\phi-\phi''\psi=0$, $\psi'\phi-\phi'\psi=$常数.

由无穷远处条件得 $\psi'\phi-\phi'\psi=0$，因此

$$\frac{\psi'}{\psi}=\frac{\phi'}{\phi},\qquad \left(\ln\frac{\psi}{\phi}\right)'=0$$

所以$\psi=$常数$\times\phi$，ψ和ϕ代表同一个态.

当$V(x)$为实函数时，ψ^*与ψ满足相同的方程，有相同的能量和相同的边界条件$\lim\limits_{x\to\infty}\psi^*=0$，故$\psi^*=c\psi$或$\psi=c^*\psi^*$，由此得$|c|^2=1$，$c=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}$. 此处$\delta$为实数. 不妨取$\delta=0$，则$c=1$，$\psi$为实数.

1.28 一维束缚态的性质

题 1.28 考虑一个一维束缚粒子：(1) 证明：$\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x,t)\psi(x,t)\mathrm{d}x=0$；(2) 证明：若某粒子在一给定的时刻是定态，则它将永远保持定态；(3) 若在$t=0$时，波函数在$-a<x<a$范围内是常数，而在其他处为零，利用系统的本征态表达以后时间的完整波函数.

解 (1)
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x,t)\psi(x,t)\,\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial}{\partial t}\left[\psi^*(x,t)\psi(x,t)\right]\mathrm{d}x$$

$$=\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\right)\psi+\psi^*\frac{\partial}{\partial t}\psi\right]\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\frac{1}{-\mathrm{i}\hbar}(\hat{H}\psi^*)\psi+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\psi^*\hat{H}\psi\right]\mathrm{d}x$$

$$=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\psi\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi^*+\psi^*\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi\right)+(-V\psi^*\psi+\psi^*V\psi)\right]\mathrm{d}x$$

$$=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^*\frac{\partial}{\partial x}\psi-\psi\frac{\partial}{\partial x}\psi^*\right)\mathrm{d}x=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left[\psi^*\frac{\partial}{\partial x}\psi-\psi\frac{\partial}{\partial x}\psi^*\right]\Bigg|_{-\infty}^{+\infty}$$

因为ψ是束缚态，$\psi(x\to\pm\infty)=0$，所以上式为 0.

(2) 所谓定态即指能量本征态. 设粒子在t_0时刻处于定态，则有$\hat{H}\psi(x,t_0)=E\psi(x,t_0)$. 任意时刻$t$，粒子满足的 Schrödinger 方程为$\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=\hat{H}\psi(x,t)$. 在$\hat{H}$不显含$t$下，积分此式得形式解

$$\psi(x,t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t-t_0)/\hbar}\psi(x,t_0)$$

不难证明，此波函数满足定态 Schrödinger 方程

$$\hat{H}\psi(x,t)=E\psi(x,t)$$

即在任意时刻也保持定态.

(3) 设

$$\psi(x,0)=\begin{cases}c, & |x|<a\\ 0, & |x|>a\end{cases}$$

式中：c 是常数，归一化得 $|c|^2=\frac{1}{2a}, c=\frac{e^{i\delta}}{\sqrt{2a}}$，$\delta$ 为位相因子. 设 $t=0$ 时刻，粒子的能量本征态完备集为 $\{\psi_n(x,0)\,|\,n=0,1,2,\cdots\}$，则有

$$\hat{H}\psi_n(x,0)=E_n\psi_n(x,0)$$

任意粒子态可用它来展开，得

$$\psi(x,0)=\sum_n a_n\psi_n(x,0)$$

a_n 是与时间无关的系数，上式两边同乘以 $\psi_m^*(x,0)$，并且从 $-\infty$ 到 $+\infty$ 积分

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_m^*(x,0)\psi(x,0)\,dx=\sum_n a_n\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_m^*(x,0)\psi_n(x,0)\,dx$$

由 ψ_n 的正交归一性，得

$$a_m=\sum_n a_n\delta_{nm}=e^{i\delta}\frac{1}{\sqrt{2a}}\int_{-a}^{a}\psi_m^*(x,0)\,dx$$

由(2)得

$$\psi(x,t)=e^{-i\hat{H}t/\hbar}\psi(x,0)=\sum_n a_n e^{-iE_nt/\hbar}\psi_n(x,0)$$

1.29　宇称(空间反演)算符

题 1.29　宇称(空间反演)算符 $\hat{\pi}$：$\hat{\pi}\psi(\boldsymbol{r})=\psi(-\boldsymbol{r})$. (1) 证明 $\hat{\pi}^\dagger=\hat{\pi}$；(2) 证明 $\hat{\pi}^2=1$，并求 $\hat{\pi}$ 的本征值、本征态.

证明　(1) 对任意的 $\psi(\boldsymbol{r})$，$\varphi(\boldsymbol{r})$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(\boldsymbol{r})\hat{\pi}\varphi(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(\boldsymbol{r})\varphi(-\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}$$

令上式右边 $\boldsymbol{r}=-\boldsymbol{r}$，有

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(\boldsymbol{r})\hat{\pi}\varphi(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}=\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(\boldsymbol{r}')[\hat{\pi}\psi(\boldsymbol{r}')]^*d\boldsymbol{r}'$$

故 $\hat{\pi}^\dagger=\hat{\pi}$.

(2) 显然有 $\hat{\pi}^2\psi(\boldsymbol{r})=\hat{\pi}\psi(-\boldsymbol{r})=\psi(\boldsymbol{r})$, 且 $\psi(\boldsymbol{r})$ 为任意的，故 $\hat{\pi}^2=1$，即 $\hat{\pi}^{-1}=\hat{\pi}=\hat{\pi}^\dagger$，宇称算符为 Hermite、自逆、幺正的. 由 $\hat{\pi}^2=1$ 可知 $\hat{\pi}$ 的本征值为 ±1，相应的本征态为

$$\hat{\pi}\psi_+(\boldsymbol{r})=\psi_+(\boldsymbol{r}),\qquad \psi_+(-\boldsymbol{r})=\psi_+(\boldsymbol{r}),\qquad \text{偶宇称态}$$

$$\hat{\pi}\psi_-(\boldsymbol{r})=-\psi_-(\boldsymbol{r}),\qquad \psi_-(-\boldsymbol{r})=-\psi_-(\boldsymbol{r}),\qquad \text{奇宇称态}$$

1.30　在 Hamilton 量定态分立谱中动量的平均值恒为零

题 1.30　在 Hamilton 量分立谱的束缚定态中证明动量的平均值恒为零.

证明　$\hat{H}=\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m}+V(\boldsymbol{r}), \hat{H}|\varphi_n\rangle=E_n|\varphi_n\rangle$，且有 $\left[\boldsymbol{r},\hat{H}\right]=i\hbar\frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{m}$，故

$$\langle \hat{p} \rangle_n = \frac{m}{\mathrm{i}\hbar}\langle \varphi_n | [\boldsymbol{r}, \hat{H}] | \varphi_n \rangle = \frac{m}{\mathrm{i}\hbar}\left[\langle \varphi_n | \boldsymbol{r}\hat{H} | \varphi_n \rangle - \langle \varphi_n | \hat{H}\boldsymbol{r} | \varphi_n \rangle\right]$$

$$= \frac{m}{\mathrm{i}\hbar} E_n \left[\langle \varphi_n | \boldsymbol{r} | \varphi_n \rangle - \langle \varphi_n | \boldsymbol{r} | \varphi_n \rangle\right]$$

$$= 0$$

以上证明过程利用了 $\hat{H}$ 的 Hermite 性 $\langle \varphi_n | \hat{H}\boldsymbol{r} | \varphi_n \rangle = \langle \varphi_n | \boldsymbol{r}\hat{H} | \varphi_n \rangle^*$，在一维的情况下，Landau 给出如下证明

$$\hat{p} = -\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$$

$$\overline{p} = -\mathrm{i}\hbar \int \psi_n^*(x) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \psi_n(x) \mathrm{d}x$$

上式左端由于 $\hat{p}$ 为可观测量，故为实数，由于一维束缚态波函数总可以取为实函数，右端为一虚数，因此必有 $\overline{p} = 0$.

1.31　广义 Virial 定理

题 1.31　在 Hermite 算符 $\hat{A}$ 的分立谱本征态下，证明 $\hat{c} = [\hat{A}, \hat{B}]$ 的平均值为零.

证明　$\hat{A} = \hat{A}^\dagger$, $\hat{A}|\varphi_n\rangle = a_n |\varphi_n\rangle$

$$\langle \hat{c} \rangle_n = \int \varphi_n^* [\hat{A}, \hat{B}] \varphi_n \mathrm{d}\tau = \int \varphi_n^* \hat{A}\, \hat{B} \varphi_n \mathrm{d}\tau - \int \varphi_n^*\, \hat{B}\hat{A} \varphi_n \mathrm{d}\tau$$

$$= \int \hat{B}\varphi_n \left(\hat{A}\varphi_n\right)^* \mathrm{d}\tau - a_n \int \varphi_n^* \hat{B} \varphi_n \mathrm{d}\tau$$

$$= a_n \int \varphi_n^* \hat{B} \varphi_n \mathrm{d}\tau - a_n \int \varphi_n^* \hat{B} \varphi_n \mathrm{d}\tau = 0$$

讨论　上面的证明过程中，$\hat{B}$ 为任意的，但必须保证 $\hat{B}\varphi_n$ 在 $\hat{A}$ 的 Hermite 定域中，即函数 $\hat{B}\varphi_n$ 保证 $\hat{A}$ 的 Hermite 性成立. 本题结果可称之为广义 Virial 定理，若 $\hat{A} = \hat{H}$ 为体系的 Hamilton 量，给出的结果则称之为超 Virial 定理.

1.32　广义 Hellmann-Feynman 定理

题 1.32　广义 Hellmann-Feynman 定理：Hermite 算符 $\hat{F} = \hat{F}(\lambda)$ 且

$$\hat{F}\psi_n(\lambda) = f_n(\lambda)\psi_n(\lambda),$$

证明：在 ψ_n 态下 $\frac{\partial f_n}{\partial \lambda} = \left\langle \frac{\partial \hat{F}}{\partial \lambda} \right\rangle$.

证明　由 $\hat{F}\psi_n(\lambda) = f_n(\lambda)\psi_n(\lambda)$，两边对 λ 求导

$$\frac{\partial \hat{F}}{\partial \lambda}\psi_n(\lambda) + \hat{F}\frac{\partial \psi}{\partial \lambda} = \frac{\partial f}{\partial \lambda}\psi_n + f_n \frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda} \tag{1}$$

式(1)向 ψ_n 态上投影，有

$$\left\langle\frac{\partial F}{\partial\lambda}\right\rangle+\int\psi_n^*\hat{F}\frac{\partial\psi_n}{\partial\lambda}\mathrm{d}\tau=\frac{\partial f_n}{\partial\lambda}+f_n\int\psi_n^*\frac{\partial\psi_n}{\partial\lambda}\mathrm{d}\tau$$

对上式左边第二项，利用$\hat{F}^\dagger=\hat{F}$

$$\int\psi_n^*\hat{F}\frac{\partial\psi_n}{\partial\lambda}\mathrm{d}\tau=\int\left(\hat{F}\psi_n\right)^*\frac{\partial\psi_n}{\partial\lambda}\mathrm{d}\tau=f_n\int\psi_n^*\frac{\partial\psi_n}{\partial\lambda}\mathrm{d}\tau$$

所以

$$\frac{\partial f_n}{\partial\lambda}=\left\langle\frac{\partial\hat{F}}{\partial\lambda}\right\rangle_n$$

实际上，式(1)向ψ_m态上投影，有更一般结果

$$\frac{\partial f_n}{\partial\lambda}\delta_{m,n}=\int\psi_m^*\frac{\partial\hat{F}}{\partial\lambda}\psi_n\mathrm{d}\tau+(f_m-f_n)\int\psi_m^*\frac{\partial\psi_n}{\partial\lambda}\mathrm{d}\tau$$

1.33　$\left[\hat{A},\hat{B}\right]_+=0$时，在 Hermite 算符$\hat{A}$的分立谱本征态下$\hat{B}$的平均值为零

题 1.33　若$\hat{A}$为 Hermite 算符，且$\left[\hat{A},\hat{B}\right]_+=0$，证明在$\hat{A}$的分立谱本征态下，$\hat{B}$的平均值为零.

证明　$\hat{A}=\hat{A}^\dagger,\hat{A}|\varphi_n\rangle=a_n|\varphi_n\rangle$，由于

$$\langle\varphi_n|\left[\hat{A},\hat{B}\right]_+|\varphi_n\rangle=2a_n\langle B\rangle_n=0$$

故

$$\langle B\rangle_n=0$$

讨论　$\hat{B}$为任意算符，但要求$\hat{B}|\varphi_n\rangle$在$\hat{A}$的 Hermite 算符定义域中.

1.34　$\left[\hat{H},\hat{A}\right]_+=0$时能量本征态的性质

题 1.34　若系统的 Hamilton 量$\hat{H}$与某个力学量$\hat{A}$反对易$\left[\hat{H},\hat{A}\right]_+=\hat{H}\hat{A}+\hat{A}\hat{H}=0$，$|E\rangle$为$\hat{H}$的本征值为$E$的本征态，若$\hat{A}|E\rangle\neq0$，则$\hat{A}|E\rangle$也是$\hat{H}$的本征态，本征值为$-E$.

证明　证明是直接的，这一结果表明，除了$\hat{A}$的零本征值外，此系统的所有能级都是正负值成对出现的.

一个简单的例子是$S=\frac{1}{2}$的带电粒子在磁场中运动

$$\hat{H}=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}=-\lambda\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}$$

其中$\boldsymbol{\mu}$为磁矩，$\boldsymbol{B}$为磁场强度，$\boldsymbol{\sigma}$为 Pauli 矩阵. 若$\boldsymbol{N}$为另一与$\boldsymbol{B}$垂直的矢量

$$\boldsymbol{N}\cdot\boldsymbol{B}=\sum_i N_iB_i=0$$

则$\hat{H}$与算符$\hat{G}=\boldsymbol{N}\cdot\boldsymbol{\sigma}$反对易

$$\left[\hat{H},\hat{G}\right]_+ = -\lambda\left[\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{N}\right]_+ = -\lambda\sum_{ij}\left[\sigma_i,\sigma_j\right]_+ B_i N_j$$

$$= -\lambda\sum_{ij}2\delta_{ij}B_i N_j = -2\lambda\sum_i B_i N_i = 0$$

故这个 $\hat{H}$ 的本征值一般是正负成对出现的，事实上，此系统的两个本征能量差一负号.

1.35 算符函数 $\hat{F}^N$ 的展开

题 1.35 设一个力学量算符 $\hat{F}$ 有 N 个不同的本征值. 试证明算符 $\hat{F}^N$ 可以写成算符 $\hat{I},\hat{F},\hat{F}^2,\cdots,\hat{F}^{N-1}$ 的线性叠加，其中 $\hat{I}$ 为单位算符.

证明 记力学量 $\hat{F}$ 的 N 个不同的本征值为 $f_1,f_2,\cdots,f_N$，$\hat{F}$ 的正交归一化本征函数完备集为 $\{\phi_k\}$. 现构造一个算符 $\hat{G}$ 为

$$\hat{G} = (\hat{F}-f_1)(\hat{F}-f_2)\cdots(\hat{F}-f_N)$$

将 $\hat{G}$ 作用在任一波函数 ψ 上，有

$$\hat{G}\psi = \hat{G}\left(\sum_k c_k\phi_k\right) = \sum_k c_k(\hat{G}\phi_k)$$

$$= \sum_k C_k(\hat{F}-f_1)(\hat{F}-f_2)\cdots(\hat{F}-f_N)\phi_k = 0$$

得 $\hat{G}=0$，即

$$(\hat{F}-f_1)(\hat{F}-f_2)\cdots(\hat{F}-f_N) = 0 \tag{1}$$

有

$$\hat{F}^N - \sum_i f_i\hat{F}^{N-1} + \frac{1}{2}\sum_{i\neq k} f_i f_k\hat{F}^{N-2} + \cdots + (-1)^N\prod_i^N f_i = 0$$

即

$$\hat{F}^N = \sum_i f_i\hat{F}^{N-1} - \frac{1}{2}\sum_{i\neq k} f_i f_k\hat{F}^{N-2} + \cdots + (-1)^{N+1}\prod_i^N f_i \tag{2}$$

式(2)表明 $\hat{F}^N$ 可以写为算符 $\hat{I},\hat{F},\hat{F}^2,\cdots,\hat{F}^{N-1}$ 的线性叠加，其中 $\hat{I}$ 为单位算符，命题得证.

例 1 若 $\hat{F}$ 只有两个不同的本征值 f_1 和 f_2，则由式(1)

$$(\hat{F}-f_1)(\hat{F}-f_2) = 0$$

有

$$\hat{F}^2 = (f_1+f_2)\hat{F} - f_1 f_2$$

例 2 若 $\hat{F}$ 有三个不同的本征值 f_1、f_2 和 f_3，则由式(1)

$$(\hat{F}-f_1)(\hat{F}-f_2)(\hat{F}-f_3) = 0$$

有

$$\hat{F}^3 = (f_1+f_2+f_3)\hat{F}^2 - (f_1 f_2 + f_1 f_3 + f_2 f_3)\hat{F} + f_1 f_2 f_3$$

例 3 轨道角动量 $\hat{F}$ 的三个直角坐标分量算符 $\hat{L}_a(a=x,y,z)$，对于 $l=1$，$\hat{L}_a$ 的本征值为 $\hbar,0,-\hbar,$ 故有

$$\hat{L}_a^3=\hbar^2\hat{L}_a$$

对于 $l=2$，$\hat{L}_a$ 的本征值为 $2\hbar,\hbar,0,-\hbar,-2\hbar,$ 故有

$$\hat{L}_a^5=5\hbar^2\hat{L}_a^3-4\hbar^4\hat{L}_a$$

1.36 坐标算符本征值谱的讨论

题 1.36 从基本量子化条件出发，求坐标算符的本征值谱(讨论一维情况).

解 设坐标算符 $\hat{x}$ 的本征值方程为

$$\hat{x}\psi_{x_0}=x_0\psi_{x_0}$$

引入线性幺正算符

$$\hat{U}(\xi)=e^{-\frac{i}{\hbar}\xi\hat{p}}\equiv\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\left(-\frac{i}{\hbar}\xi\right)^n}{n!}\hat{p}^n$$

式中：$\hat{p}$ 是动量算符；ξ 是实参数，在区间 $(-\infty,\infty)$ 内连续可变. 利用基本量子化条件 $[\hat{x},\hat{p}]=i\hbar$，有

$$[\hat{x},\hat{U}(\xi)]=\sum_{n=0}^{\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n\frac{\xi^n}{n!}[\hat{x},\hat{p}^n]=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{\xi}{i\hbar}\right)^n[\hat{x},\hat{p}^n]$$

$$=i\hbar\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{\xi}{i\hbar}\right)^n\left(n\hat{p}^{n-1}\right)$$

$$=i\hbar\left(\frac{\xi}{i\hbar}\right)\left[\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{i}{\hbar}\xi\right)^n\hat{p}^n\right]$$

$$=\xi\hat{U}(\xi)$$

即

$$\hat{x}\hat{U}(\xi)=\hat{U}(\xi)(\hat{x}+\xi) \tag{1}$$

把式(1)左右两边同时作用到 $\hat{x}$ 的本征函数 ψ_{x_0} 上，有

$$\hat{x}\hat{U}(\xi)\psi_{x_0}=\hat{U}(\xi)(\hat{x}+\xi)\psi_{x_0}=\hat{U}(\xi)(x_0+\xi)\psi_{x_0}$$
$$=(x_0+\xi)\hat{U}(\xi)\psi_{x_0} \tag{2}$$

比较式(2)的左右两边可知，$\hat{U}(\xi)\psi_{x_0}$ 也是坐标算符 $\hat{x}$ 的本征函数，相应的本征值为 $x_0+\xi$. 表明若 x_0 是 $\hat{x}$ 的一个本征值，则 x_0 加上任意的实参数 ξ 也是 $\hat{x}$ 的一个本征值，而 ξ 取区间 $(-\infty,\infty)$ 内的一切实数值，加上 $\hat{x}$ 是线性 Hermite 算符，本征值 x_0 已是实数，所以 $\hat{x}$ 的本征值取 $(-\infty,\infty)$ 内的一切实数值，构成连续谱.

1.37 动量算符本征值谱的讨论

题 1.37 从基本量子化条件出发，求动量算符的本征值谱(讨论一维情况).

解 动量算符的本征值方程为

$$\hat{p}\psi_{p_0} = p_0\psi_{p_0}$$

引入线性幺正算符

$$\hat{U}(\eta) = e^{\frac{i}{\hbar}\eta\hat{x}} \equiv \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\left(\frac{i}{\hbar}\eta\right)^n}{n!}\hat{x}^n$$

式中：$\hat{x}$是坐标算符，它与动量算符之间遵从基本的对易关系式$[\hat{x},\hat{p}]=i\hbar$；η为实参数，在区间$(-\infty,\infty)$内连续可变. 有

$$\left[\hat{p},\hat{U}(\eta)\right] = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\hat{x}}\hat{U}(\eta) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\hat{x}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\eta\hat{x}\right) = \eta\hat{U}(\eta)$$

即

$$\hat{p}\hat{U}(\eta) = \hat{U}(\eta)(\hat{p}+\eta)$$

将$\hat{p}\hat{U}(\lambda)$作用到$\hat{p}$的本征函数上

$$\hat{p}\hat{U}(\eta)\psi_{p_0} = \hat{U}(\mu)(\hat{p}+\eta)\psi_{p_0} = \hat{U}(\eta)(p_0+\eta)\psi_{p_0}$$

即

$$\hat{p}\hat{U}(\eta)\psi_{p_0} = (p_0+\eta)\hat{U}(\eta)\psi_{p_0}$$

表明$\hat{U}(\eta)\psi_{p_0}$是动量算符$\hat{p}$对应于本征值$p_0+\eta$的本征函数，即$\hat{p}$的本征值可为$p_0+\eta$，而η取区间$(-\infty,\infty)$内的一切实数值，故$\hat{p}$的本征值谱为连续谱，取区间$(-\infty,\infty)$内的一切实数值.

1.38 坐标平移算符的本征值及本征态

题 1.38 试求算符$\hat{T}(a)\equiv e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}}$的本征值谱和本征函数集. 其中$\hat{p}=\frac{\hbar}{i}\cdot\frac{d}{dx}$为动量算符，$a$为一个给定的实常量.

解 (1) 先求$\hat{T}(a)$的本征值谱. 由算符的本征值方程

$$\hat{T}(a)\psi_\lambda(x) = \lambda\psi_\lambda(x) \tag{1}$$

出发，将算符$\left[\hat{T}(a)\right]^\dagger = \left[\hat{T}(a)\right]^{-1}$左乘方程(1)两边再作积分运算$\int dx\psi_\lambda^*(x)$得

$$\int\psi_\lambda^*(x)\left[\hat{T}(a)\right]^\dagger\hat{T}(a)\psi_\lambda(x)dx = \int\psi_\lambda^*(x)\left[\hat{T}(a)\right]^\dagger\lambda\psi_\lambda(x)dx$$

即

$$\int|\psi_\lambda(x)|^2dx = \lambda\int\psi_\lambda(x)\left[\hat{T}(a)\psi_\lambda(x)\right]^*dx = \lambda\lambda^*\int|\psi_\lambda(x)|^2dx$$

得

$$|\lambda|^2=1,\qquad 即\lambda=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta}\xrightarrow{记为}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka} \tag{2}$$

式中：a 为算符 $\hat{T}(a)$ 中给定的实常量，k 为标记本征值 λ 的"量子数"，它可取区间 $(-\infty,\infty)$ 中的一切实数值. 事实上，由 $\hat{T}(a)=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}a}$ 是动量算符 $\hat{p}$ 的函数直接可知，它的本征值为动量算符的本征值 $p=\hbar k$，本征值谱为连续谱.

(2) 再求 $\hat{T}(a)$ 的本征函数集. 将式(2)代入式(1)有

$$\hat{T}(a)\psi_k(x)=\mathrm{e}^{-a\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}}\psi_k(x)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}\psi_k(x) \tag{3}$$

而

$$\mathrm{e}^{-a\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}}\psi_k(x)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-a)^n}{n!}\cdot\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\psi_k(x)=\psi_k(x-a) \tag{4}$$

再引入函数 $u_k(x)$

$$u_k(x)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\psi_k(x),\qquad 即\ \psi_k(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}u_k(x) \tag{5}$$

联合式(3)、式(4)、式(5)，有

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x-a)}u_k(x-a)=\psi_k(x-a)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}\psi_k(x)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}u_k(x)$$

由此得到函数 $u_k(x)$ 满足的条件为

$$u_k(x)=u_k(x-a) \tag{6}$$

式(6)表明，$u_k(x)$ 是 x 的周期函数，周期为 a. 于是算符 $\hat{T}(a)$ 的本征函数为

$$\psi_k(x)=u_k(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$$

此即调幅平面波.

1.39　轨道角动量算符 $\hat{L}_z$ 的 Hermite 性条件

题 1.39　(1) 证明：为了保证 $\hat{L}_z=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$ 是 Hermite 算符，波函数 $\psi(r,\theta,\varphi)$ 必须满足单值性条件

$$\psi(r,\theta,\varphi)=\psi(r,\theta,\varphi+2\pi) \tag{1}$$

(2) 在球坐标系中，粒子角动量的 z 分量 $\hat{L}_z=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$，于是按照关于 $\hat{x}$ 和 $\hat{p}_x$ 的对易规则来推论，人们期望下列对易关系和不确定性关系或许会成立

$$\left[\varphi,\hat{L}_z\right]=\mathrm{i}\hbar \tag{2}$$

$$\Delta\hat{L}_z\cdot\Delta\varphi\geqslant\frac{\hbar}{2} \tag{3}$$

试说明：式(2)在一般情况下是不成立的，而式(3)是和 Heisenberg 不确定性关系矛盾的.

证明　(1) 若 $\hat{L}_z$ 是 Hermite 算符，则它应该满足 Hermite 算符的定义式，即对于任意两个波函数 f、ψ 有

$$\int f^*\hat{L}_z\psi\mathrm{d}\tau=\int(\hat{L}_zf^*)\psi\mathrm{d}\tau \tag{4}$$

若 $f=f(r,\theta)$ 与 φ 无关，则由于 $\hat{L}_z=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$，有 $\hat{L}_z f=0$，因此由式(4)给出

$$\int f^*\hat{L}_z\psi\mathrm{d}\tau=0$$

即

$$\int_0^\infty r^2\mathrm{d}r\int_0^\pi\sin\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}f^*(r,\theta)\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi(r,\theta,\varphi)\mathrm{d}\varphi=0$$

由于被积函数 r,θ 部分有任意性，因此要求

$$\int_0^{2\pi}\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi(r,\theta,\varphi)\mathrm{d}\varphi=\psi(r,\theta,\varphi)\Big|_0^{2\pi}=0$$

又由于 $\varphi=0$ 的方向可以任意选择，故上式亦即

$$\psi(r,\theta,\varphi)=\psi(r,\theta,\varphi+2\pi) \tag{5}$$

此即周期性边界条件(1).

(2) 由(1)所述，欲保证 $\hat{L}_z=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$ 的 Hermite 性，函数 $\psi(r,\theta,\varphi)$ 必须满足周期性边界条件(5). 但是一般来说，如果函数 $\psi(r,\theta,\varphi)$ 满足条件(5)，则 ψ 乘以自变量 φ 后的结果 $\varphi\psi$ 就一定不满足条件(5)，除非 $\psi(r,\theta,\varphi)=\psi(r,\theta,\varphi+2\pi)=0$. 故将式(2)左边作用于函数 ψ 上，有

$$[\varphi,\hat{L}_z]\psi=\varphi(\hat{L}_z\psi)-\hat{L}_z(\varphi\psi)$$

由于 $\varphi\psi$ 不满足条件(5)，故 $\hat{L}_z(\varphi\psi)$ 不能表示可观测量. 这样就把对易关系式(2)的正确性仅仅只限制在要求 $\psi(r,\theta,\varphi)=\psi(r,\theta,\varphi+2\pi)=0$ 这样一类特殊的函数上，故式(2)在一般情况下不成立. 且 φ 与 $\hat{L}_z=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$ 也不是一对正则共轭变量.

显然式(3)与 Heisenberg 不确定性关系也是不一致的. 因为在球坐标系内，φ 的取值范围是 $[0,2\pi]$，φ 属于有限空间，使得不确定量 $\Delta\varphi$ 也必须是有限的. 于是，如果 $\Delta L_z\to 0$，则 $\Delta\hat{L}_z\cdot\Delta\varphi=0$，导致式(3)变为 $0\geqslant\frac{\hbar}{2}$ 的错误结果. 既然不能建立 φ 与 $\hat{L}_z$ 间的对易关系式 $[\varphi,\hat{L}_z]=\mathrm{i}\hbar$，也就不会有 $\Delta\hat{L}_z\cdot\Delta\varphi\geqslant\frac{\hbar}{2}$ 的不确定性关系式. 但是用 φ 的一个周期函数 $f(\varphi)$ (周期为 2π)去代替 φ，就可以建立 $f(\varphi)$ 与 $\hat{L}_z$ 之间的不确定关系. 例如 $\sin\varphi$ 和 $\cos\varphi$ 是与 $\hat{L}_z$ 同域的 Hermite 算符，有

$$[\sin\varphi,\hat{L}_z]=\mathrm{i}\hbar\cos\varphi$$

$$[\cos\varphi,\hat{L}_z]=-\mathrm{i}\hbar\sin\varphi$$

得

$$(\Delta\hat{L}_z)^2(\Delta\sin\varphi)^2\geqslant\frac{\hbar^2}{4}\overline{\cos\varphi}^2$$

$$(\Delta\hat{L}_z)^2(\Delta\cos\varphi)^2\geqslant\frac{\hbar^2}{4}\overline{\sin\varphi}^2$$

1.40　Kubo 恒等式

题 1.40　设两个算符 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 不对易：$[A,B]\neq 0, a, \lambda$ 为参变数，试证明

$$-\left[\hat{A},\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\right]=\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\int_0^a \mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}[A,B]\mathrm{e}^{-\lambda\hat{B}}\mathrm{d}\lambda \tag{1}$$

上式叫作 Kubo 恒等式.

证明　若 $a=0$，则式(1)两边均等于零，Kubo 恒等式成立若 $a\neq 0$，则对式(1)左边作运算 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}a}$

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}a}\left\{-\left[\hat{A},\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\right]\right\}&=-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}a}\left(\hat{A}\mathrm{e}^{-a\hat{B}}-\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\hat{A}\right)=\hat{A}\hat{B}\mathrm{e}^{-a\hat{B}}-\hat{B}\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\hat{A}\\&=-\hat{B}\left(\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\hat{A}-\hat{A}\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\right)-\hat{B}\hat{A}\mathrm{e}^{-a\hat{B}}+\hat{A}\hat{B}\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\\&=-\hat{B}\left(\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\hat{A}-\hat{A}\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\right)+[\hat{A},\hat{B}]\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\\&=\hat{B}\left[\hat{A},\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\right]+[\hat{A},\hat{B}]\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\end{aligned} \tag{2}$$

对式(1)右边作运算 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}a}$

$$\begin{aligned}&\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}a}\left\{\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\int_0^a \mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}[\hat{A},\hat{B}]\mathrm{e}^{-\lambda\hat{B}}\mathrm{d}\lambda\right\}\\&=(-\hat{B})\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\int_0^a \mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}[\hat{A},\hat{B}]\mathrm{e}^{-\lambda\hat{B}}\mathrm{d}\lambda+\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}a}\left\{\int_0^a \mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}[\hat{A},\hat{B}]\mathrm{e}^{-\lambda\hat{B}}\mathrm{d}\lambda\right\}\\&=(-\hat{B})\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\int_0^a \mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}[\hat{A},\hat{B}]\mathrm{e}^{-\lambda\hat{B}}\mathrm{d}\lambda+\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\mathrm{e}^{a\hat{B}}[\hat{A},\hat{B}]\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\\&=-\hat{B}\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\int_0^a \mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}[\hat{A},\hat{B}]\mathrm{e}^{-\lambda\hat{B}}\mathrm{d}\lambda+[\hat{A},\hat{B}]\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\end{aligned} \tag{3}$$

比较式(2)和式(3)，看出式(1)的左、右两边满足相同的微分方程，故

$$-\left[\hat{A},\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\right]=\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\int_0^a \mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}[\hat{A},\hat{B}]\mathrm{e}^{-\lambda\hat{B}}\mathrm{d}\lambda$$

成立.

1.41　压缩算符的转置及 Hermite 共轭算符

题 1.41　定义压缩算符 $\hat{M}_c, \hat{M}_c\psi(x)=\dfrac{1}{\sqrt{c}}\psi\left(\dfrac{x}{c}\right), c>0$. 证明

$$\hat{M}_c^T=\hat{M}_{1/c},\qquad \hat{M}_c^\dagger=\hat{M}_{1/c}=\hat{M}_c^{-1}$$

证明　算符 $\hat{F}$ 的转置算符的定义为，对任意的 $\psi(x),\phi(x)$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\hat{F}^T\phi(x)\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{\infty}\left[\hat{F}\psi^*(x)\right]\phi(x)\mathrm{d}x$$

故

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\hat{M}_c^T\phi(x)\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{\infty}\left[\hat{M}_c\psi^*(x)\right]\phi(x)\mathrm{d}x=\frac{1}{\sqrt{c}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\left(\frac{x}{c}\right)\phi(x)\mathrm{d}x$$

上式中令$\frac{x}{c}\to x$，故上式又可写为

$$\sqrt{c}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\phi(cx)\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\hat{M}_{1/c}\phi(x)\mathrm{d}x$$

故有$\hat{M}_c^T=\hat{M}_{1/c}$，进一步，$\hat{M}_c^\dagger=\left(\hat{M}_c^*\right)^T=\hat{M}_{1/c}=\hat{M}_c^{-1}$.

1.42 算符$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial r}$的转置及 Hermite 共轭算符

题 1.42 求算符$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial r}$的转置及 Hermite 共轭算符$(0\leqslant r<\infty)$.

解

$$\int\psi^*\left(\frac{\partial}{\partial r}\phi\right)r^2\mathrm{d}r\mathrm{d}\Omega=\int\mathrm{d}\Omega(\psi^*\phi r^2)\Big|_0^\infty-\int\left[\left(\frac{2}{r}+\frac{\partial}{\partial r}\right)\psi^*\right]\phi r^2\mathrm{d}r\mathrm{d}\Omega$$

$$=-\int\left[\left(\frac{2}{r}+\frac{\partial}{\partial r}\right)\psi^*\right]\phi\mathrm{d}V=\int\left[\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^T\psi^*\right]\phi\mathrm{d}V$$

其中，$\mathrm{d}V=r^2\mathrm{d}r\mathrm{d}\Omega$. 所以

$$\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^T=-\left(\frac{2}{r}+\frac{\partial}{\partial r}\right),\qquad\left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial r}\right)^\dagger=\mathrm{i}\left(\frac{2}{r}+\frac{\partial}{\partial r}\right)$$

以上推导过程中要求$\psi^*r^2\Big|_0^\infty=0$.

1.43 对 Hermite 算符$\hat{A},\hat{B}$，算符$(\hat{A}+\mathrm{i}\hat{B})^2$Hermite 性的条件

题 1.43 $\hat{A}^\dagger=\hat{A},\hat{B}^\dagger=\hat{B},\hat{F}\equiv\hat{A}+\mathrm{i}\hat{B}$，在什么条件下$\hat{F}^2$为 Hermite 算符?

解

$$\hat{F}^2=\hat{A}^2-\hat{B}^2+\mathrm{i}(\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A})$$

若$\hat{F}^2$为 Hermite 算符，则有$[\hat{A},\hat{B}]_+=\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}=0$.

1.44 压缩算符在x表象中的表示

题 1.44 定义压缩算符$\hat{M}_c:c=\mathrm{e}^\lambda$

$$\hat{M}_c=\exp\left[-\frac{\mathrm{i}\lambda}{2\hbar}(\hat{p}\hat{x}+\hat{x}\hat{p})\right]=\exp\left[-\frac{\lambda}{2}\left(1+2x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\right]$$

证明：(1) $\hat{M}_c\hat{x}\hat{M}_c^{-1}=\frac{\hat{x}}{c}$, $\hat{M}_c\hat{p}\hat{M}_c^{-1}=c\hat{p}$；(2) $\hat{M}_c\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{c}}\psi\left(\frac{x}{c}\right)$.

证明　(1) 利用 $e^{\lambda\hat{A}}\hat{B}e^{-\lambda\hat{A}}=\hat{B}+\lambda[\hat{A},\hat{B}]+\dfrac{\lambda^2}{2!}[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]+\cdots$ 及 $[\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x},\hat{x}]=-2\mathrm{i}\hbar x$，有

$$\hat{M}_c\hat{x}\hat{M}_c^{-1}=\left(1+\frac{\lambda^2}{2!}+\frac{\lambda^4}{4!}+\cdots\right)\hat{x}-\left(\lambda+\frac{\lambda^3}{3!}+\cdots\right)\hat{x}$$

$$=e^{-\lambda}\hat{x}=\frac{\hat{x}}{c}$$

同理

$$\hat{M}_c\hat{p}\hat{M}_c^{-1}=c\hat{p}$$

(2)

$$\hat{M}_c=\sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{m!}\left(-\frac{\lambda}{2}\right)^m\left(1+2x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^m$$

$$\psi(x)=\sum_{n=0}^{\infty}C_nx^n$$

$$\hat{M}_c\psi(x)=\sum_{m,n}C_n\frac{(-\lambda/2)^m}{m!}\left(1+2x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^m x^n$$

$$=\sum_n C_n\sum_m\frac{1}{m!}\left(-\frac{\lambda}{2}\right)^m(1+2n)^m x^n$$

$$=\sum_n C_nx^n\exp\left[-\lambda\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]=e^{-\frac{\lambda}{2}}\sum_n C_n(e^{-\lambda}x)^n$$

$$=\frac{1}{\sqrt{c}}\psi\left(\frac{x}{c}\right)$$

1.45　压缩相干态在 x 表象中的表示

题 1.45　位移谐振子的基态称为相干态

$$\psi_0(x-x_0)=e^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}x_0\hat{p}}\psi_0(x)=\left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{1/4}e^{-\frac{\alpha^2}{2}(x-x_0)^2}$$

其中，$\alpha=\left(\dfrac{\mu\omega}{\hbar}\right)^{1/2}$. 定义压缩相干态 $\psi_c(x)\equiv\hat{M}_c\psi_0(x-x_0)$. (1) 求 $\psi_c(x)$ 在 x 表象中的形式. (2) 在该态下求 Δx， Δp 及 $\Delta x\cdot\Delta p$，并与相干态情况比较.

解　(1)

$$\psi_c(x)\equiv\hat{M}_c\psi_0(x-x_0)=\frac{1}{\sqrt{c}}\psi_0\left(\frac{x}{c}-x_0\right)$$

$$=\left(\frac{\alpha^2}{\pi c^2}\right)^{1/4}\exp\left[-\frac{\alpha^2(x-cx_0)^2}{2c^2}\right]$$

(2) 由 Gauss 分布有 $\Delta x=\dfrac{c}{\sqrt{2}\alpha},\ \overline{x}=cx_0,\ \overline{x^2}=\dfrac{c^2}{2\alpha^2}+c_0^2x_0^2$ 或者由

$$\langle x\rangle_c=\int\left[\hat{M}_c\psi_0(x-x_0)\right]^*x\left[\hat{M}_c\psi_0(x-x_0)\right]\mathrm{d}x$$

$$= \int \psi_0^* (x-x_0)(\hat{M}_c^\dagger x \hat{M}_c)\psi_0(x-x_0)\mathrm{d}x$$

$$= \int \psi_0^*(x-x_0)(cx)\psi_0(x-x_0)\mathrm{d}x = cx_0$$

$$\left\langle x^2 \right\rangle_c = c^2 \int \psi_0^*(x-x_0)x^2\psi_0(x-x_0)\mathrm{d}x = c^2\left\langle x^2\right\rangle_{\psi_0}$$

故

$$(\Delta x)_c = \frac{c}{\sqrt{2}\alpha} = c(\Delta x)_{\psi_0}$$

同样由

$$\langle p\rangle_c = \int \psi_0^*(x-x_0)\frac{\hat{p}}{c}\psi_0(x-x_0)\mathrm{d}x = \frac{1}{c}\langle p\rangle_{\psi_0}$$

有

$$(\Delta p)_c = \frac{1}{c}(\Delta p)_{\psi_0} = \frac{\alpha\hbar}{\sqrt{2}c}$$

故

$$(\Delta x)_c\cdot(\Delta p)_c = (\Delta x)_{\psi_0}(\Delta p)_{\psi_0} = \frac{\hbar}{2}$$

与相干态一样，为最小不确定态，但可调节 c 使 Δx 和 Δp 中一个量增大(减小)而另一个量减小(增大)，故称为压缩相干态.

1.46　压缩态的另一种形式

题 1.46　压缩态的另外一种形式

$$\varphi_c(x) = \hat{D}_{x_0}\hat{M}_c\psi_0(x)$$

其中 $\psi_0(x) = \left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \mathrm{e}^{-\frac{\alpha^2x^2}{2}}$ 为谐振子基态，$\hat{D}_{x_0} = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}x_0\hat{p}}$ 为坐标平移算符. (1) 求 $\varphi_c(x)$ 在 x 表象中的形式. (2) 证明 $\varphi_c(x)$ 也是压缩态. (3)证明 $\hat{M}_c\hat{D}_{x_0} = \hat{D}_{cx_0}\hat{M}_c$.

解　(1) $\varphi_c(x) = \hat{D}_{x_0}\left(\frac{\alpha^2}{\pi c^2}\right)^{1/4} \mathrm{e}^{-\frac{\alpha^2x^2}{2c^2}} = \left(\frac{\alpha^2}{\pi c^2}\right)^{1/4} \mathrm{e}^{-\frac{\alpha^2(x-x_0)^2}{2c^2}}$

(2) 同上题 $(\Delta x)_c = \frac{c}{\sqrt{2}\alpha}, (\Delta p)_c = \frac{\alpha\hbar}{\sqrt{2}c}$.

(3) 由 $\hat{M}_c\hat{p}\hat{M}_c^\dagger = c\hat{p}$ ，有

$$\hat{M}_c\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}x_0\hat{p}}\hat{M}_c^\dagger = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}cx_0\hat{p}}$$

故

$$\hat{M}_c\hat{D}_{x_0} = \hat{D}_{cx_0}\hat{M}_c$$

1.47 Fourier(积分)变换的性质

题 1.47 证明 Fourier 变换性质，若 $F[\psi(x)]=\phi(p)$，则：(1) $F[x^n\psi(x)]=\left(\mathrm{i}\hbar\dfrac{d}{dp}\right)^n\phi(p)$；(2) $F\left[\left(-\mathrm{i}\hbar\dfrac{d}{dx}\right)^n\psi(x)\right]=p^n\phi(p)$；(3) $F[\psi(x+x_0)]=\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px_0}\phi(p)$；(4) $F[\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}xp_0}\psi(x)]=\phi(p-p_0)$.

证明 (1)
$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\right)^n\phi(p)=\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\right)^n\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{d}x$$
$$=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)^n\psi(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{d}x$$
$$=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}x^n\psi(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{d}x$$

所以
$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\right)^n\phi(p)=F[x^n\psi(x)]$$

(2) 同理
$$F\left[\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^n\psi(x)\right]=p^n\phi(p)$$

(3)
$$\psi(x+x_0)=\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{p}x_0}\psi(x)$$
$$=\mathrm{e}^{x_0\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}}\psi(x)$$
$$=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{\mathrm{i}x_0}{\hbar}\right)^n\hat{p}^n\psi(x)$$

由(2)
$$F[\psi(x+x_0)]=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{\mathrm{i}x_0}{\hbar}\right)^n p^n\phi(p)$$
$$=\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px_0}\phi(p)$$

(4) 同理可证.

1.48 动量空间的 Schrödinger 方程

题 1.48 一个质量为 m 的粒子受力 $F(\boldsymbol{r})=-\nabla V(\boldsymbol{r})$ 作用，使其波函数满足动量空间 Schrödinger 方程

$$\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}-a\nabla_{\boldsymbol{p}}^2\right)\varphi(\boldsymbol{p},t)=\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\varphi(\boldsymbol{p},t)$$

其中$\hbar=1$，a是某一实常数，且

$$\nabla_p^2=\frac{\partial^2}{\partial p_x^2}+\frac{\partial^2}{\partial p_y^2}+\frac{\partial^2}{\partial p_z^2}$$

求$V(\boldsymbol{r})$.

解 根据对应$\boldsymbol{r}\leftrightarrow \mathrm{i}\nabla_p$以及动量空间 Schrödinger 方程

$$\left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V\left(\mathrm{i}\nabla_{\boldsymbol{p}}\right)\right]\varphi(\boldsymbol{p},t)=\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\varphi(\boldsymbol{p},t)$$

得

$$V(\boldsymbol{r})=a\boldsymbol{r}^2$$

力$F(\boldsymbol{r})$为

$$F(\boldsymbol{r})=-\nabla V(\boldsymbol{r})=-2a\boldsymbol{r}$$

1.49 $F=\alpha p+\beta x$ 的本征态

题 1.49 求 Hermite 算符$F=\alpha p+\beta x$的本征值为f的本征态.

解 F的本征方程为

$$-\mathrm{i}\hbar\alpha\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_f(x)+\beta x\psi_f(x)=f\psi_f(x)$$

其解为

$$\psi_f(x)=C\exp\left(-\frac{\mathrm{i}(\beta x-f)^2}{2\hbar\alpha\beta}\right)$$

归一化常数为C，由归一化条件

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{f'}^*(x)\psi_f(x)\mathrm{d}x=\delta(f-f')$$

确定$C=(2\pi\hbar\alpha)^{-\frac{1}{2}}$.

1.50 算符 $x+\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ 的本征态

题 1.50 求算符$x+\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$的本征值为$f$的本征态.

解 本征方程为

$$\left(x+\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\psi_f(x)=f\psi_f(x)$$

解为

$$\psi_f(x)=C\exp\left[-\frac{(x-f)^2}{2}\right]$$

由于算符非 Hermite，故其本征值一般为复数，设 $f=f_1+\mathrm{i}f_2$，归一化的本征函数

$$\overline{\psi}_f(x)=\left(\frac{1}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\exp\left[-\frac{(x-f_1)^2}{2}+\mathrm{i}f_2x\right]$$

1.51　两反对易算符存在共同本征态的条件

题 1.51　算符 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 反对易，$\left[\hat{A},\hat{B}\right]_+=0$，若 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 存在共同的本征态 ψ_{ab}，$\hat{A}\psi_{ab}=a\psi_{ab},\hat{B}\psi_{ab}=b\psi_{ab}$，则必有 $ab=0$.

证明　由 $\left[\hat{A},\hat{B}\right]_+\psi_{ab}=2ab\psi_{ab}=0$，有 $ab=0$. 如宇称算符 $\hat{\pi}$ 和坐标算符 $\hat{x}$，$[\hat{\pi},\ \hat{x}]_+=0$，它们存在共同的本征态 $\delta(x)$，且 $\pi=1,x=0$.

1.52　线性算符在连续谱表象中的矩阵元——积分核

题 1.52　线性算符 $\hat{A}$ 在 $\hat{Q}$ 表象(本征值 Q 为连续谱)

$$\psi'(Q)=\hat{A}\psi(Q)=\int A(Q,Q')\psi(Q')\mathrm{d}Q'$$

$A(Q,Q')$ 为算符 $\hat{A}$ 的积分核，是一个普通的二元函数(实际上是 $\hat{A}$ 在 $\hat{Q}$ 表象中的矩阵元)，求线性算符 $\hat{A}$ 在 x 表象中的积分核 $A(x,x')$ 与在 p 表象中的积分核 $A(p,p')$ 之间的关系.

解　对任一态矢 $|\psi\rangle$，在 x 表象中

$$\psi'(x)=\hat{A}\psi(x)=\int A(x,x')\psi(x')\mathrm{d}x' \tag{1}$$

在 p 表象中

$$\phi'(p)=\hat{A}\phi(p)=\int A(p,p')\phi(p')\mathrm{d}p' \tag{2}$$

注意到

$$\psi(x)=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{1/2}\int\varphi(p)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{d}p \tag{3}$$

把式(3)代入式(1)，两边左乘以 $\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{1/2}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}$，对 x 积分

$$\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)\int\psi'(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{d}x=\phi'(p)$$

$$=\int\mathrm{d}x\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\int\mathrm{d}x'A(x,x')\int\mathrm{d}p'\phi(p')\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p'x'}\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}$$

对照式(2)，可知

$$A(p,p')=\frac{1}{2\pi\hbar}\iint A(x,x')\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p'x'-px)}\mathrm{d}x\mathrm{d}x'$$

同理

$$A(x,x')=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)\iint A(p,p')\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p'x'-px)}\mathrm{d}p\mathrm{d}p'$$

对三维的情况有

$$A(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3\iint A(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})}\mathrm{d}\boldsymbol{r}\mathrm{d}\boldsymbol{r}'$$

$$A(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3\iint A(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})}\mathrm{d}\boldsymbol{p}\mathrm{d}\boldsymbol{p}'$$

1.53 算符$\frac{1}{r}$和$\frac{1}{r^2}$的积分核

题 1.53 求算符$\frac{1}{r}$和$\frac{1}{r^2}$的积分核.

解 在坐标表象中，显然有：

算符$\hat{A}_1=\frac{1}{r}$的积分核

$$A_1(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')=\frac{1}{r}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$$

算符$\hat{A}_2=\frac{1}{r^2}$的积分核

$$A_2(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')=\frac{1}{r^2}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$$

而在动量表象中

$$A_1(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3\iint\frac{1}{r}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})}\mathrm{d}\boldsymbol{r}\mathrm{d}\boldsymbol{r}'$$

$$=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3\iint\frac{1}{r}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\frac{1}{2\pi^2\hbar(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')^2}$$

上面最后一步利用积分公式$\int\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}}{r}\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\frac{4\pi}{k^2}$，得

$$A_2(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3\iint\frac{1}{r^2}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})}\mathrm{d}\boldsymbol{r}\mathrm{d}\boldsymbol{r}'$$

$$=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3\iint\frac{1}{r^2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

$$=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi}\frac{1}{r^2}\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}|\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}|r\cos\theta\right]r^2\sin\theta\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi$$

$$=\frac{1}{4\pi\hbar^2|\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}|}$$

积分中利用公式

$$\int_0^\infty \frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x=\frac{\pi}{2}$$

注意到 $\hat{A}_2=\hat{A}_1^2$，可以验证有 $A_2(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')=\int A_1(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}'')\cdot A_1(\boldsymbol{p}'',\boldsymbol{p}')\mathrm{d}\boldsymbol{p}''$，一般地，设 $\hat{A}$ 的核为 $A(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')$，则 $\hat{A}^2$ 的核为

$$A^2(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')=\int A(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}'')\cdot A(\boldsymbol{p}'',\boldsymbol{p}')\mathrm{d}\boldsymbol{p}''$$

1.54　算符 $\hat{L}$ 的 $\hat{L}^*,\hat{L}^T,\hat{L}^\dagger$ 的积分核

题 1.54　线性算符 $\hat{L}$ 的积分核为 $L(\xi,\xi')$，求 $\hat{L}^*,\hat{L}^T,\hat{L}^\dagger$ 的积分核，分别讨论下列算符：宇称算符 $\hat{\pi}$，压缩算符 $\hat{M}_c$，坐标平移算符 $\hat{T}_a$，$\hat{x}=x$，$\hat{p}=-\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$.

解

$$\begin{aligned}L^*(\xi,\xi')&=[L(\xi,\xi')]^*\\ L^T(\xi,\xi')&=L(\xi',\xi)\\ L^\dagger(\xi,\xi')&=L^*(\xi',\xi)\end{aligned}\tag{1}$$

其中式(1)的证明如下，由 $\hat{L}^T$ 的定义

$$\int\varphi^*(\xi)\hat{L}^T\psi(\xi)\mathrm{d}\xi=\int[\hat{L}\varphi^*(\xi)]\psi(\xi)\mathrm{d}\xi\tag{2}$$

$$\int\varphi^*(\xi)\hat{L}^T\psi(\xi)\mathrm{d}\xi=\int\int\varphi^*(\xi)L^T(\xi,\xi')\psi(\xi')\mathrm{d}\xi'\mathrm{d}\xi\tag{3}$$

$$\int[\hat{L}\varphi^*(\xi)]\psi(\xi)\mathrm{d}\xi=\int\int L(\xi,\xi')\varphi^*(\xi')\psi(\xi)\mathrm{d}\xi'\mathrm{d}\xi\tag{4}$$

在式(4)右边，令 ξ 和 ξ' 互换

$$\int[\hat{L}\varphi^*(\xi)]\psi(\xi)\mathrm{d}\xi=\int\int\varphi^*(\xi)L(\xi',\xi)\psi(\xi')\mathrm{d}\xi'\mathrm{d}\xi\tag{5}$$

由式(2)、式(3)、式(5)，且 ψ,φ 是任意的，有

$$L^T(\xi,\xi')=L(\xi',\xi)$$

对于宇称算符，$\hat{\pi}\psi(x)=\psi(-x)$，即

$$\int\pi(x,x')\psi(x')\mathrm{d}x'=\psi(-x)=\int\delta(x+x')\psi(x')\mathrm{d}x'$$

所以

$$\pi(x,x')=\delta(x+x')$$

对于压缩算符 $\hat{M}_c\psi(x)=\dfrac{1}{\sqrt{c}}\psi\left(\dfrac{x}{c}\right)$

$$\int M_c(x,x')\psi(x')\mathrm{d}x'=\frac{1}{\sqrt{c}}\int\delta\left(\frac{x}{c}-x'\right)\psi(x')\mathrm{d}x'$$

所以

$$M_c(x,x')=\frac{1}{\sqrt{c}}\delta\left(\frac{x}{c}-x'\right)$$

同理

$$\hat{T}_a\psi(x)=\psi(x-a),\qquad T_a(x,x')=\delta(x-a-x')$$

$$X(x,x')=x\delta(x-x'),\qquad P(x,x')=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x')$$

1.55　已知算符 $\hat{L}$ 积分核的形式，讨论 $\hat{L}$ 的 Hermite 条件

题 1.55　$L(x,x')$ 为 $\hat{L}$ 的积分核，若：(1) $L=f(x+x')$；(2) $L=f(x-x')$；(3) $L=f(x)g(x')$．当 f,g 满足什么条件时，$\hat{L}$ 为 Hermite 算符．

解　当 $\hat{L}^{\dagger}=\hat{L}$ 时，有 $L^{\dagger}(x,x')=L^{*}(x',x)=L(x,x')$．$\hat{L}$ 为 Hermite 算符的条件是：(1) $f(x)$ 为实函数．(2) $f(x)$ 是偶宇称的实函数．(3) $f(x)=cg^{*}(x)$，其中 c 为实常数．

1.56　两对易算符的积分核之间的关系

题 1.56　$\hat{L}$ 的积分核为 $L(x,x')$，$\left[\hat{G},\hat{L}\right]=0$，若 $\hat{L}$ 为：(1) $\hat{x}=x$；(2) $\hat{p}=-\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$．求 $\hat{G}$ 的积分核 $G(x,x')$．

解　若 $\hat{C}=\hat{A}\hat{B}$，则

$$C(x,x')=\int A(x,x'')B(x'',x')\,\mathrm{d}x'' \tag{1}$$

(1) 算符 $\hat{x}=x$ 的积分核 $X(x,x')=x\delta(x-x')$，若 $\hat{G}\hat{x}=\hat{x}\hat{G}$，由式(1)

$$\int[G(x,x'')x''\delta(x''-x')-x\delta(x-x'')G(x'',x')]\,\mathrm{d}x''=(x-x')G(x,x')=0$$

有 $G(x,x')=g(x)\delta(x-x')$，这里 $g(x)$ 是任意函数．

(2) 由 $\hat{G}\hat{P}=\hat{P}\hat{G}$，且 $P(x,x')=-\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\delta(x-x')$，有

$$\left(\frac{\partial}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial x'}\right)G(x,x')=0$$

故

$$G(x,x')=g(x-x')$$

1.57　与 $\hat{x},\hat{p}$ 都对易的算符为常数算符

题 1.57　证明若 $\hat{F}$ 与 $\hat{x},\hat{p}$ 都对易，则 $\hat{F}$ 为常数算符，即 $\hat{F}=F_0$．

证明　由 $\left[\hat{F},\hat{x}\right]=0$ 及 $\left[\hat{F},\hat{p}\right]=0$，有

$$F(x,x')=f(x)\delta(x-x') \tag{1}$$

$$F(x,x')=g(x-x') \tag{2}$$

由式(1)、式(2)得 $f(x)=F_0=\mathrm{const}$，故

$$F(x,x')=F_0\delta(x-x')$$

所以 $\hat{F}=F_0$.

另外证明为 $\left[\hat{x},\hat{F}(x,p)\right]=\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial\hat{F}}{\partial p}=0$, $\left[\hat{p},\hat{F}(x,p)\right]=-\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial\hat{F}}{\partial x}=0$, 故

$$\hat{F}=F_0=\text{const}$$

1.58 积分核形如 $F(x,x')=f(x)f^*(x')$ 算符的本征值、本征态

题 1.58 $\hat{F}$ 的积分核 $F(x,x')=f(x)f^*(x')$，求其本征值、本征态.

解 由本征方程 $\hat{F}\psi(x)=f\psi(x)$，有

$$f(x)\int_{-\infty}^{\infty}f^*(x')\psi(x')\mathrm{d}x'=f\psi(x) \tag{1}$$

(1) 方程(1)的一个解为 $\psi_0(x)=cf(x)$，相应的本征值为

$$f_0=\int|f(x)|^2\mathrm{d}x>0$$

(2) 方程(1.99)的另一个可能解 $\psi_1(x)$ 满足

$$\int_{-\infty}^{\infty}f^*(x)\psi_1(x)\mathrm{d}x=0$$

相应的本征值 $f_1=0$，即 $\psi_1(x)$ 与 $f(x)$ 正交.

1.59 若 $\hat{\pi}\psi(x)=\psi(-x)$ 则 $\hat{\pi}\varphi(p)=\varphi(-p)$

题 1.59 $\hat{\pi}$ 为宇称算符 $\hat{\pi}\psi(x)=\psi(-x)$，若 $\varphi(p)=F[\psi(x)]$ 为 $\psi(x)$ 在 p 表象中的表示，证明 $\hat{\pi}\varphi(p)=\varphi(-p)$.

证明 在 x 表象中 $\hat{\pi}$ 的积分核 $\delta(x+x')$，则在 p 表象中 $\hat{\pi}$ 的积分核为

$$\begin{aligned}\pi(p,p')&=\frac{1}{2\pi\hbar}\int\int\delta(x+x')\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p'x'-px)\right]\mathrm{d}x\mathrm{d}x'\\&=\frac{1}{2\pi\hbar}\int\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p'+p)x\right]\mathrm{d}x=\delta(p+p')\end{aligned}$$

故

$$\hat{\pi}\varphi(p)=\int\delta(p+p')\varphi(p')\mathrm{d}p'=\varphi(-p)$$

1.60 算符函数在连续谱表象中的矩阵元——积分核

题 1.60 $\hat{A}^\dagger=\hat{A}$ 且 $\hat{A}\varphi_n(q)=A_n\varphi_n(q)$，$F\left(\hat{A}\right)$ 为 $\hat{A}$ 的整函数，求 $F(q,q')$.

解 任意函数 $\psi(q)=\sum\limits_n a_n\varphi_n(q)$, $\hat{F}\left(\hat{A}\right)=\sum\limits_m C_m\hat{A}^m$

$$\psi'=\hat{F}\psi=\sum_{mn}C_m a_n A_n^m\varphi_n(q)=\sum_n a_n\varphi_n(q)\sum_m C_m A_n^m=\sum_n C_n F(A_n)\varphi_n(q) \tag{1}$$

$$\hat{F}\psi(q)=\sum_n C_n\int F(q,q')\varphi_n(q')\mathrm{d}q' \tag{2}$$

由式(1)，式(2)有

$$F(q,q')=\sum_m F(A_m)\varphi_m^*(q')\varphi_m(q)$$

1.61 投影定理

题 1.61 算符 $\hat{F}$ 的本征值为 f_i，相应的本征态为 ψ_i $(i=1,2,3,\cdots)$，定义投影算符 $\hat{p}_i$，$\hat{p}_i\psi_k=\delta_{ik}\psi_i=\begin{cases}\psi_i, & f_i=f_k\\ 0, & f_i\neq f_k\end{cases}$. 证明 $\hat{p}_i^\dagger=\hat{p}_i$，$\hat{p}_i^2=\hat{p}_i$.

证明 对任意的 ψ,φ，$\psi=\sum_k a_k\psi_k$，$\varphi=\sum_k b_k\psi_k$.

(1) $\int\varphi^*\hat{p}_i\psi\mathrm{d}\tau=\int\varphi^*\hat{p}_i\sum_k a_k\psi_k\mathrm{d}\tau=a_i\int\varphi^*\psi_i\mathrm{d}\tau=a_ib_i^*=\int[\hat{p}_i\varphi]^*\psi\mathrm{d}\tau$，故 $\hat{p}_i^\dagger=\hat{p}_i$.

(2) 因为 $\hat{p}_i\psi=a_i\psi_i$，$\hat{p}_i^2\psi=a_i\psi_i$，故 $\hat{p}_i^2=\hat{p}_i$.

1.62 投影算子

题 1.62 构造投影算子 $\hat{p}(x\geqslant 0)$, $\hat{p}\psi(x)=\begin{cases}\psi(x), & x\geqslant 0\\ 0, & x<0\end{cases}$

解

$$\hat{p}=\theta(x)=\begin{cases}1, & x\geqslant 0\\ 0, & x<0\end{cases}$$

显然 $\hat{p}^\dagger=\hat{p}$, $\hat{p}^2=\hat{p}$，且

$$\hat{p}\psi(x)=\begin{cases}\psi(x), & x\geqslant 0\\ 0, & x<0\end{cases}$$

1.63 投影算子的积分核

题 1.63 投影算子 $\hat{p}^\dagger=\hat{p}$, $\hat{p}^2=\hat{p}$，求其积分核.

解 $p(x,x')=cf(x)f^*(x')$，且 $c^{-1}=\int|f(x)|^2\mathrm{d}x$，显然有 $\hat{p}^\dagger=\hat{p}$,这是因为

$$[p(x,x')]^\dagger=p^*(x',x)=p(x,x')$$

以及 $\hat{p}^2=\hat{p}$，因为

$$p^2(x,x')=\int p(x,x'')p(x'',x')\mathrm{d}x''=p(x,x')$$

且 $\hat{p}f(x)=c\int f(x)f^*(x')f(x')\mathrm{d}x'=f(x)$，即 $f(x)$ 为 $\hat{p}$ 的本征值为 1 的本征态. 所有满足

$\int f^*(x)\psi(x)\mathrm{d}x=0$ 的 $\psi(x)$ 态(与 $f(x)$ 正交)为 $\hat{p}$ 的零本征值的本征态.

1.64　投影算子的形式

题 1.64　Hermite 算符 $\hat{F}$ 有 n 个不同的本征值，$f_i\ (i=1,2,3,\cdots,n)$，算子 $\hat{p}_i$ 是向 $\hat{F}$ 的本征值为 f_i 的本征态 φ_i 上投影的投影算子，求 $\hat{p}_i$ 的形式.

解

$$\hat{p}_i=\prod_{k=1}^{n}{}'\frac{(\hat{F}-f_k)}{(f_i-f_k)}$$

式中：连积号 $\prod\limits_{k=1}^{n}{}'$ 中不含有 $k=i$ 的因子.

设任意函数 $\psi=\sum\limits_j C_j\varphi_j$，只需证明 $\hat{p}_i\psi=C_i\varphi_i$，事实上

$$\hat{p}_i\psi=\prod_{k=1}^{n}{}'\frac{(\hat{F}-f_k)}{(f_i-f_k)}\cdot\sum_j C_j\varphi_j=\sum_j C_j\left[\prod_{k=1}^{n}{}'\frac{(\hat{F}-f_k)}{(f_i-f_k)}\varphi_j\right]$$

上式右边方括号内，若 $j=i$，则分子、分母相同其值为1，若 $j\neq i$，则分子中 $n-1$ 个因子中必有一个为零，即

$$\prod_{k=1}^{n}{}'\frac{(\hat{F}-f_k)}{(f_i-f_k)}\varphi_j=\delta_{ij}$$

$$\hat{p}_i\psi=C_i\varphi_i$$

1.65　力学量平均值对时间的二次微商

题 1.65　证明力学量 A (不显含 t)的平均值对时间的二次微商为

$$-\hbar^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\bar{A}=\overline{[[A,H],H]}$$

H 为 Hamilton 量.

证明　不显含 t 的算符 A 平均值的时间导数为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\bar{A}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int\psi^*(x)A\psi(x)\mathrm{d}x=\int\frac{\partial}{\partial t}[\psi^*(x)A\psi(x)]\mathrm{d}x$$

$$=\int\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}A\psi-\psi^*A\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)\mathrm{d}x$$

$$=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int[\psi^*AH\psi-(H\psi^*)A\psi]\mathrm{d}x=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[A,H]}$$

同理可知，A 平均值的二次时间微商为

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\bar{A}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[A,H]}\right)=-\frac{1}{\hbar^2}\overline{[[A,H],H]}$$

1.66 坐标算符平均值对时间的二次微商

题 1.66 证明对于一组波包，有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{\hat{x}^2}=\frac{1}{m}\overline{(\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x})}$$

证明 由题意可设 $A=\hat{x}^2$，考虑到 $H=\dfrac{p^2}{2m}+V(x)$，有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{\hat{x}^2}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{\left[\hat{x}^2,H\right]}=\frac{1}{2m\mathrm{i}\hbar}\overline{\left[\hat{x}^2,\hat{p}^2\right]}=\frac{1}{m}\overline{\left[\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x}\right]}$$

1.67 算符整函数与 $\hat{x},\hat{p}$ 的对易关系

题 1.67 设 $F(x,p)$是 x_k，p_k的整函数，证明

$$[p_k,F]=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\cdot\frac{\partial F}{\partial x_k},\qquad [x_k,F]=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial F}{\partial p_k}$$

整函数是指可展开成 $F(x,p)=\sum\limits_{m,n}\sum\limits_{k,l=1}^{3}C_{kl}^{mn}x_k^m p_l^n$ 的函数.

证明 由对易关系 $[x_k,p_l]=\mathrm{i}\hbar\delta_{kl}$，易证 $[x_k,p_l^n]=\mathrm{i}\hbar np_l^{n-1}\delta_{kl},[p_k,x_l^m]=-\mathrm{i}\hbar mx_l^{m-1}\delta_{kl}$，所以

$$\begin{aligned}[p_k,F]&=[p_k,\sum_{mn}\sum_{j,l=1}^{3}C_{jl}^{mn}x_j^m p_l^n]=\sum_{mn}\sum_{j,l=1}^{3}C_{jl}^{mn}[p_k,x_j^m]p_l^n\\&=\sum_{mn}\sum_{j,l=1}^{3}C_{jl}^{mn}[-\mathrm{i}\hbar mx_k^{m-1}]p_l^n\delta_{jk}=\sum_{mn}\sum_{l=1}^{3}C_{kl}^{mn}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x_k}x_k^m\right)p_l^n\\&=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\cdot\frac{\partial F}{\partial x_k}\end{aligned}$$

同理可得

$$[x_k,F]=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial F}{\partial p_k}$$

1.68 Baker-Hausdorff 公式

题 1.68 给定算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$，令 $\hat{C}_0=\hat{B},\hat{C}_1=\left[\hat{A},\hat{B}\right],\hat{C}_2=\left[\hat{A},\hat{C}_1\right],\cdots,\hat{C}_n=\left[\hat{A},\hat{C}_{n-1}\right],\cdots$，若 λ 为参变量，则有如下 Baker-Hausdorff 公式

$$\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n}{n!}\hat{C}_n$$

先用 $\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}$ 的指数定义式直接验证此公式的前三项，接着作一般性证明.

证明 令 $f(\lambda)=\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}}$，将 $f(\lambda)$ 按 λ 作级数展开，有

$$f(\lambda)=\sum_n f^{(n)}(0)\frac{\lambda^n}{n!}$$

对照上式，只须证明下列关系即可

$$f^{(n)}(0)=\hat{C}_n$$

下面用数学归纳法证明. 先验证前三项. 将 $f(\lambda)$ 按 λ 展开，有

$$e^{\lambda\hat{A}}\hat{B}e^{-\lambda\hat{A}}=\left(1+\lambda\hat{A}+\frac{1}{2}\lambda^2\hat{A}^2+\cdots\right)\hat{B}\left(1-\lambda\hat{A}+\frac{1}{2}\lambda^2\hat{A}^2-\cdots\right)$$

上式右边:

只含 λ^0 的项的系数: $\hat{B}=\hat{C}_0$;

只含 λ^1 的项的系数: $\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}=\left[\hat{A},\hat{B}\right]=\hat{C}_1$;

只含 λ^2 的项的系数: $-\hat{A}\hat{B}\hat{A}+\frac{1}{2}\hat{A}^2\hat{B}+\frac{1}{2}\hat{B}\hat{A}^2=\frac{1}{2}\left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right]=\frac{1}{2}\hat{C}_2$.

⋮

由此可知

$$f(\lambda)=e^{\lambda\hat{A}}\hat{C}_0\,e^{-\lambda\hat{A}},\qquad f^{(0)}(0)=\hat{C}_0$$

$$\frac{df(\lambda)}{d\lambda}=e^{\lambda\hat{A}}\hat{C}_1\,e^{-\lambda\hat{A}},\qquad f^{(1)}(0)=\hat{C}_1$$

$$\frac{d^2f(\lambda)}{d\lambda^2}=e^{\lambda\hat{A}}\hat{C}_2\,e^{-\lambda\hat{A}},\qquad f^{(2)}(0)=\hat{C}_2$$

假设

$$\frac{d^{n-1}}{d\lambda^{n-1}}f(\lambda)=e^{\lambda\hat{A}}\hat{C}_{n-1}\,e^{-\lambda\hat{A}},\qquad f^{(n-1)}(0)=\hat{C}_{n-1}$$

则

$$\begin{aligned}\frac{d^n}{d\lambda^n}f(\lambda)&=\frac{d}{d\lambda}\left[e^{\lambda\hat{A}}\hat{C}_{n-1}\,e^{-\lambda\hat{A}}\right]\\&=\hat{A}e^{\lambda\hat{A}}\hat{C}_{n-1}\,e^{-\lambda\hat{A}}-e^{\lambda\hat{A}}\hat{C}_{n-1}\,e^{-\lambda\hat{A}}\hat{A}\\&=e^{\lambda\hat{A}}\left[\hat{A},\hat{C}_{n-1}\right]e^{-\lambda\hat{A}}=e^{\lambda\hat{A}}\hat{C}_n\,e^{-\lambda\hat{A}}\end{aligned}$$

故有

$$f^{(n)}(0)=\hat{C}_n$$

得证.

1.69 Glauber 公式

题 1.69 证明 $e^{\lambda(\hat{A}+\hat{B})}=e^{\lambda\hat{A}}e^{\lambda\hat{B}}e^{-\frac{1}{2}\lambda^2\hat{C}}=e^{\lambda\hat{B}}e^{\lambda\hat{A}}e^{\frac{1}{2}\lambda^2\hat{C}}$，其中 $\hat{C}=\left[\hat{A},\hat{B}\right]$ 且与 $\hat{A},\hat{B}$ 都对易. 验证它是上面 Baker-Hausdorff 公式的特殊情况.

证明 令 $f(\lambda)=e^{\lambda\hat{A}}e^{\lambda\hat{B}}$，则

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}f(\lambda)=\hat{A}f(\lambda)+\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}=\hat{A}f(\lambda)+\sum_n\frac{\lambda^n}{n!}\hat{A}^n\hat{B}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}$$

因为$\left[\hat{A},\hat{B}\right]$与$\hat{A},\hat{B}$对易，易证$\left[\hat{A}^n,\hat{B}\right]=n\left[\hat{A},\hat{B}\right]\hat{A}^{n-1}$，即有$\hat{A}^n\hat{B}=\hat{B}\hat{A}^n+n\left[\hat{A},\hat{B}\right]\hat{A}^{n-1}$，代入上式得

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}f(\lambda)&=\hat{A}f(\lambda)+\hat{B}\sum_n\frac{\lambda^n}{n!}\hat{A}^n\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}+\left[\hat{A},\hat{B}\right]\sum_n n\frac{\lambda^n}{n!}\hat{A}^{n-1}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\\&=(\hat{A}+\hat{B}+\lambda\hat{C})f(\lambda)\end{aligned}$$

同理，可证

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}f(\lambda)=f(\lambda)(\hat{A}+\hat{B}+\lambda\hat{C})$$

因为$\left[f,(\hat{A}+\hat{B}+\lambda\hat{C})\right]=0$，所以，可对上式积分得

$$f(\lambda)=\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}+\lambda\hat{B}+\frac{1}{2}\lambda^2\hat{C}}$$

$$\mathrm{e}^{\lambda(\hat{A}+\hat{B})}=\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\lambda^2\hat{C}}$$

又可证$\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\lambda^2\hat{C}}=\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\frac{1}{2}\lambda^2\hat{C}}$，只需将上题中的$\hat{B}$换成$\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}$，且$\hat{C}_n=0\,(n\geqslant 2)$, 则

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}}&=\sum_n\frac{\lambda^n}{n!}\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{B}^n\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}}=\sum_n\frac{\lambda^n}{n!}(\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}})^n\\&=\sum_n\frac{\lambda^n}{n!}(\lambda\hat{C}_0+\lambda^2\hat{C}_1)^n=\mathrm{e}^{\lambda\hat{C}_0+\lambda^2\hat{C}_1}=\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}+\lambda^2\hat{C}}\end{aligned}$$

$\hat{B}$与$\hat{C}$对易，所以

$$\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}=\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda^2\hat{C}}$$

1.70 对易关系的一个重要结果

题 1.70 设$\hat{A},\hat{B}$不对易，令$\hat{C}=\left[\hat{A},\hat{B}\right]$，设$\hat{C}$与$\hat{B}$对易，即$\left[\hat{B},\hat{C}\right]=0$. 证明

$$\left[\hat{A},\hat{B}^n\right]=n\hat{C}\hat{B}^{n-1},\qquad\left[\hat{A},\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\right]=\lambda\hat{C}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}$$

特例

$$\left[\hat{A},\mathrm{e}^{\hat{B}}\right]=\hat{C}\mathrm{e}^{\hat{B}},\qquad\left[\hat{A},f(\hat{B})\right]=\hat{C}f'(\hat{B})$$

$f(\hat{B})$是可以表成$\hat{B}$正幂级数展开的函数.

证明 用数学归纳法. 因为$n=1$时式子成立，假设$\left[\hat{A},\hat{B}^{n-1}\right]=(n-1)\hat{C}\hat{B}^{n-2}$，则

$$\begin{aligned}\left[\hat{A},\hat{B}^n\right]&=\left[\hat{A},\hat{B}\hat{B}^{n-1}\right]=\left[\hat{A},\hat{B}\right]\hat{B}^{n-1}+\hat{B}\left[\hat{A},\hat{B}^{n-1}\right]\\&=\hat{C}\hat{B}^{n-1}+(n-1)\hat{B}\hat{C}\hat{B}^{n-2}\end{aligned}$$

因为$\hat{C}$与$\hat{B}$对易，$\left[\hat{A},\hat{B}^n\right]=n\hat{C}\hat{B}^{n-1}$，证毕.

所以

$$\left[\hat{A}, e^{\lambda\hat{B}}\right]=\left[\hat{A}, \sum_n \frac{1}{n!}\lambda^n \hat{B}^n\right]=\sum_n \frac{1}{n!}\lambda^n\left[\hat{A}, \hat{B}^n\right]=\sum_n \lambda^n \frac{1}{n!} n\hat{C}\hat{B}^{n-1}=\lambda\hat{C}e^{\lambda\hat{B}}$$

对于特例$\left[\hat{A}, e^{\hat{B}}\right]$只需令上式中$\lambda=1$，即可得证. 对于$\left[\hat{A}, f(\hat{B})\right]$

$$\left[\hat{A}, f(\hat{B})\right]=\left[\hat{A}, \sum_{n=0} a_n \hat{B}^n\right]=a_0\left[\hat{A}, \hat{B}\right]+\sum_{n=1} a_n\left[\hat{A}, \hat{B}^n\right]$$
$$=\sum_{n=1} n a_n \hat{C}\hat{B}^{n-1}=\hat{C}f'(\hat{B})$$

1.71　矢量算符的点乘积、叉乘积与标量算符的对易关系

题 1.71　设$\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$为矢量算符，$F$为标量算符，证明

$$[F,\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}]=[F,\boldsymbol{A}]\cdot\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A}\cdot[F,\boldsymbol{B}]$$

$$[F,\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}]=[F,\boldsymbol{A}]\times\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A}\times[F,\boldsymbol{B}]$$

证明

$$[F,\boldsymbol{A}]\cdot\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A}\cdot[F,\boldsymbol{B}]=F\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}-\boldsymbol{A}F\cdot\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A}\cdot F\boldsymbol{B}-\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}F$$
$$=[F,\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}]$$
$$[F,\boldsymbol{A}]\times\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A}\times[F,\boldsymbol{B}]=F\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}-\boldsymbol{A}F\times\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A}\times F\boldsymbol{B}-\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}F$$
$$=[F,\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}]$$

1.72　轨道角动量算符与整函数算符的对易子

题 1.72　设F是由$\hat{\boldsymbol{r}}$、$\hat{\boldsymbol{p}}$构成的整函数算符，证明

$$\left[\hat{\boldsymbol{L}},F\right]=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial F}{\partial\hat{\boldsymbol{p}}}\times\hat{\boldsymbol{p}}-\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{r}}\times\frac{\partial F}{\partial\hat{\boldsymbol{r}}}$$

证明

$$\left[\hat{\boldsymbol{L}},F\right]=\left[\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}},F\right]=\left[\hat{\boldsymbol{r}},F\right]\times\hat{\boldsymbol{p}}+\hat{\boldsymbol{r}}\times\left[\hat{\boldsymbol{p}},F\right]$$

由题 1.67 结果可知

$$\left[\hat{\boldsymbol{L}},F\right]=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial F}{\partial\hat{\boldsymbol{p}}}\times\hat{\boldsymbol{p}}-\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{r}}\times\frac{\partial F}{\partial\hat{\boldsymbol{r}}}$$

1.73　轨道角动量与动量算符的两个代数关系

题 1.73　证明

$$\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}+\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}=2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}$$

$$\mathrm{i}\hbar(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}-\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})=\left[\hat{\boldsymbol{L}}^2,\hat{\boldsymbol{p}}\right]$$

注　在证明这一类题时，切记算符不可随便交换顺序. 利用三个关系式

$$A\cdot(B\times C)=(A\times B)\cdot C$$
$$A\times(B\times C)=A_\alpha BC_\alpha-(A\cdot B)C$$
$$(A\times B)\times C=A_\alpha BC_\alpha-A(B\cdot C)$$

其中 A, B, C 是矢量算符. 上面采用了 Einstein 求和约定，以后也一直采用. 再给出几个常用的对易子

$$[x_i,x_j]=0,\qquad [p_i,p_j]=0,\qquad [x_i,p_j]=\mathrm{i}\hbar\delta_{ij}$$
$$[L_i,x_j]=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}x_k,\quad [L_i,p_j]=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}p_k,\quad [L_i,L_j]=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}L_k$$

以及

$$r\times r=0,\qquad p\times p=0,\qquad L\times L=\mathrm{i}\hbar L,\qquad L=r\times p$$

证明　用分量来求

$$(\hat{p}\times\hat{L}+\hat{L}\times\hat{p})_x=\hat{p}_y\hat{L}_z-\hat{p}_z\hat{L}_y+\hat{L}_y\hat{p}_z-\hat{L}_z\hat{p}_y$$
$$=[\hat{p}_y,\hat{L}_z]+[\hat{L}_y,\hat{p}_z]=2\mathrm{i}\hbar\hat{p}_x$$
$$[\hat{L}^2,\hat{p}_x]=[\hat{L}_x^2+\hat{L}_y^2+\hat{L}_z^2,\hat{p}_x]$$
$$=[\hat{L}_y,\hat{p}_x]\hat{L}_y+\hat{L}_y[\hat{L}_y,\hat{p}_x]+[\hat{L}_z,\hat{p}_x]\hat{L}_z+\hat{L}_z[\hat{L}_z,\hat{p}_x]$$
$$=\mathrm{i}\hbar[-\hat{p}_z\hat{L}_y-\hat{L}_y\hat{p}_z+\hat{p}_y\hat{L}_z+\hat{L}_z\hat{p}_y]$$
$$=\mathrm{i}\hbar(\hat{p}\times\hat{L}-\hat{L}\times\hat{p})_x$$

同理，动量在 y, z 方向的分量，也具有上面的对易关系.

1.74　矢量算符与角动量算符的一般代数关系

题 1.74　证明

$$\hat{r}\cdot\hat{L}=\hat{L}\cdot\hat{r}=0,\qquad \hat{p}\cdot\hat{L}=\hat{L}\cdot\hat{p}=0$$
$$(\hat{L}\times\hat{p})\cdot\hat{p}=0,\qquad \hat{p}\cdot(\hat{p}\times\hat{L})=0$$
$$(\hat{p}\times\hat{L})\cdot\hat{L}=0,\qquad \hat{L}\cdot(\hat{L}\times\hat{p})=0$$
$$(\hat{L}\times\hat{p})\cdot\hat{L}=0,\qquad \hat{L}\cdot(\hat{p}\times\hat{L})=0$$
$$(\hat{p}\times\hat{L})\cdot\hat{p}=\hat{p}\cdot(\hat{L}\times\hat{p})=2\mathrm{i}\hbar\hat{p}^2$$
$$\hat{p}\times(\hat{L}\times\hat{p})=-(\hat{L}\times\hat{p})\times\hat{p}=\hat{L}\hat{p}^2$$

证明

$$(\hat{L}\cdot\hat{r})^\dagger=\hat{r}\cdot\hat{L}=\hat{r}\cdot(\hat{r}\times\hat{p})=(\hat{r}\times\hat{r})\cdot\hat{p}=0$$

同理可得

$$\hat{p}\cdot\hat{L}=\hat{L}\cdot\hat{p}=0$$
$$(\hat{L}\times\hat{p})\cdot\hat{p}=\hat{L}\cdot(\hat{p}\times\hat{p})=0$$
$$\hat{p}\cdot(\hat{p}\times\hat{L})=(\hat{p}\times\hat{p})\cdot\hat{L}=0$$
$$(\hat{p}\times\hat{L})\cdot\hat{L}=\hat{p}\cdot(\hat{L}\times\hat{L})=\mathrm{i}\hbar\hat{p}\cdot\hat{L}=0$$
$$\hat{L}\cdot(\hat{L}\times\hat{p})=(\hat{L}\times\hat{L})\cdot\hat{p}=\mathrm{i}\hbar\hat{L}\cdot\hat{p}=0$$

下面用到题 1.72 结论

$$(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\cdot\hat{\boldsymbol{L}}=(2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})\cdot\hat{\boldsymbol{L}}=2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}=0=\hat{\boldsymbol{L}}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})$$

$$(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})\cdot\hat{\boldsymbol{L}}=(2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\cdot\hat{\boldsymbol{p}}=2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}^2=\hat{\boldsymbol{p}}\cdot(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})$$

$$[\hat{\boldsymbol{p}}\times(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})]_i=\hat{\boldsymbol{p}}\cdot L_i\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{p}_i(\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})=\hat{p}_j\hat{L}_i\hat{p}_j=(\hat{L}_i\hat{p}_j-\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{p}_k)\hat{p}_j=\hat{L}_i\hat{p}_j\hat{p}_j$$

$$[(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\times\hat{\boldsymbol{p}}]_i=\hat{\boldsymbol{L}}\cdot(\hat{p}_i\hat{\boldsymbol{p}})-\hat{L}_i(\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})=(\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})\hat{p}_i-\hat{L}_i(\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})=-\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{p}}^2$$

讨论　更一般的结果，若 $\boldsymbol{A}$ 为矢量算符，即

$$[L_\alpha,A_\beta]=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\gamma,\qquad \alpha,\beta,\gamma=1,2,3 \tag{1}$$

则有

$$[\boldsymbol{L}^2,\boldsymbol{A}]=\mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{A}) \tag{2}$$

$$\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{L}+\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{A}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{A} \tag{3}$$

上面式(2)的证明如下

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{L}^2,\boldsymbol{A}]&=[L_\alpha L_\alpha,A_\beta\boldsymbol{e}_\beta]=L_\alpha[L_\alpha,A_\beta]\boldsymbol{e}_\beta+[L_\alpha,A_\beta]L_\alpha\boldsymbol{e}_\beta\\&=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}L_\alpha A_\gamma\boldsymbol{e}_\beta+\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\gamma L_\alpha\boldsymbol{e}_\beta=\mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{A})\end{aligned}$$

其中利用了

$$\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\alpha B_\beta\boldsymbol{e}_\gamma=-\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\beta B_\alpha\boldsymbol{e}_\gamma$$

式(3)的证明：由式(1) $L_\alpha A_\beta=A_\beta L_\alpha+\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\theta}A_\theta$ 可知

$$\begin{aligned}\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{A}&=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\alpha L_\beta\boldsymbol{e}_\gamma=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}L_\beta A_\alpha\boldsymbol{e}_\gamma+\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\alpha\beta\theta}A_\theta\boldsymbol{r}_\gamma\\&=-\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{L}+2\mathrm{i}\hbar\delta_{\theta,\gamma}A_\theta\boldsymbol{e}_\gamma=-\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{L}+2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{A}\end{aligned}$$

其中

$$\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\alpha\beta\theta}=2\delta_{\theta,\gamma}$$

附　关于矢量算符 $\boldsymbol{A}$ 与角动量 $\boldsymbol{L}$ 的一些代数结果.

若 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$，$[L_\alpha,A_\beta]=\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\gamma$，则有

$$[\boldsymbol{L}^2,\boldsymbol{A}]=\mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{A}) \tag{4}$$

$$\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{L}+\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{A}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{A} \tag{5}$$

$$[\boldsymbol{L},\boldsymbol{A}^2]=0 \tag{6}$$

由式(4)、式(5)、式(6)进一步得到结果

$$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{L})\cdot\boldsymbol{L}=\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{L})=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{L}$$

$$\boldsymbol{L}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{L})=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{A}$$

$$(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{A})\cdot\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{A})$$

$$\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{L})=(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{A})\cdot\boldsymbol{L}$$

$$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{L})\cdot\boldsymbol{A}=-\boldsymbol{L}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{A})+2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{A}^2$$

$$\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{A})=-(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{A})\cdot\boldsymbol{L}+2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{A}^2$$

$$\boldsymbol{L}\cdot(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{A})=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{A}$$

$$(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{A})\cdot\boldsymbol{L}=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{L}$$

$$\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{A})=\boldsymbol{A}^2\boldsymbol{L}+\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{A}-(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{L})\boldsymbol{A}$$

$$(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{A})\times\boldsymbol{A}=-\boldsymbol{A}^2\boldsymbol{L}+\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}(\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{A})$$

不难看出本题结果是上述各式之特例，$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{P}$.

1.75　$\hat{L}^2, \hat{p}^2$ 的代数结果

题 1.75　证明

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2=\hat{\boldsymbol{r}}^2\hat{\boldsymbol{p}}^2-(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})^2+\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}$$

$$\hat{\boldsymbol{p}}^2=\frac{1}{r^2}\hat{\boldsymbol{L}}^2+p_r^2=\frac{1}{r^2}\hat{\boldsymbol{L}}^2-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)$$

注　$p_r=\dfrac{1}{2}\left(\dfrac{1}{r}\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}\dfrac{1}{r}\right)$.

证明

$$\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{L}}^2&=(\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}})=[(\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\times\hat{\boldsymbol{r}}]_i\hat{p}_i\\
&=\hat{\boldsymbol{r}}\cdot(\hat{p}_i\hat{\boldsymbol{r}})\hat{p}_i-\hat{r}_i(\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{r}})\hat{p}_i=\hat{r}_j\hat{p}_i\hat{r}_j\hat{p}_i-\hat{r}_i\hat{p}_j\hat{r}_j\hat{p}_i\\
&=\hat{r}_j(\hat{r}_j\hat{p}_i-\mathrm{i}\hbar\delta_{ij})\hat{p}_i-(\hat{p}_j\hat{r}_i+\mathrm{i}\hbar\delta_{ij})\hat{r}_j\hat{p}_i\\
&=\hat{\boldsymbol{r}}^2\hat{\boldsymbol{p}}^2-\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{p}_j\hat{r}_j\hat{r}_i\hat{p}_i-\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\\
&=\hat{\boldsymbol{r}}^2\hat{\boldsymbol{p}}^2-\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}-(\hat{r}_j\hat{p}_j-\mathrm{i}\hbar\delta_{jj})\hat{r}_i\hat{p}_i-\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\\
&=\hat{\boldsymbol{r}}^2\hat{\boldsymbol{p}}^2+\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}-(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})^2
\end{aligned}$$

其中，用到了 $\delta_{jj}=3$.

在球坐标下 $\hat{\boldsymbol{p}}=-\mathrm{i}\hbar\nabla=-\mathrm{i}\hbar\left(\boldsymbol{e}_r\dfrac{\partial}{\partial r}+\boldsymbol{e}_\theta\dfrac{1}{r}\cdot\dfrac{\partial}{\partial\theta}+\boldsymbol{e}_\varphi\dfrac{1}{r\sin\varphi}\cdot\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right)$，由径向动量的定义

$$\begin{aligned}
\hat{p}_r\psi&=\frac{1}{2}\left(\frac{1}{r}\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}\frac{1}{r}\right)\psi\\
&=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\left(\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\cdot\nabla+\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\cdot\nabla+\left(\nabla\cdot\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\right)\right)\psi\\
&=-\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\cdot\nabla+\frac{1}{2}\left(\nabla\cdot\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\right)\right)\psi
\end{aligned}$$

将 $\nabla\cdot\dfrac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}=\dfrac{1}{r}\nabla\cdot\hat{\boldsymbol{r}}+\nabla\dfrac{1}{r}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}=\dfrac{2}{r}$ 代入上式可得

$$\hat{p}_r\psi=-\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)\psi$$

ψ 为任意波函数，故有

$$\hat{p}_r=-\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)$$

不难得到

$$\hat{p}_r^2=-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\cdot\frac{\partial}{\partial r}\right)=-\hbar^2\nabla_r^2$$

因为 $\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}=-\mathrm{i}\hbar r\dfrac{\partial}{\partial r}$，$(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})^2=-\hbar^2\left(r^2\dfrac{\partial^2}{\partial r^2}+r\dfrac{\partial}{\partial r}\right)$，由上面一问得

$$\frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{r^2}=\hat{\boldsymbol{p}}^2-\frac{(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})^2}{r^2}+\mathrm{i}\hbar\frac{\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}}{r^2}=\hat{\boldsymbol{p}}^2+\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\cdot\frac{\partial}{\partial r}\right)+\hbar^2\frac{1}{r}\cdot\frac{\partial}{\partial r}$$

$$=\hat{\boldsymbol{p}}^2+\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\cdot\frac{\partial}{\partial r}\right)=\hat{\boldsymbol{p}}^2-p_r^2$$

$$\hat{\boldsymbol{p}}^2=\frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{r^2}+p_r^2=\frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{r^2}-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\cdot\frac{\partial}{\partial r}\right)$$

注意　题 1.74，题 1.75 证明的是算符恒等式，在证明时应考虑到在它们的后面尚有一任意的波函数.

1.76　$\hat{L}$, $\hat{r}$, $\hat{p}$ 的混合积与二重叉积

题 1.76　证明

$$(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\cdot\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}=-\frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{r}$$

$$\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\cdot(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})=-\frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{r}+2\hbar^2\frac{\partial}{\partial r}$$

$$\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\times(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})+(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\times\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}=2\mathrm{i}\hbar\frac{\hat{\boldsymbol{L}}}{r}$$

证明

$$\hat{\boldsymbol{L}}=\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{r}}\times\nabla=-\mathrm{i}\hbar\left[\boldsymbol{e}_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}-\boldsymbol{e}_\theta\frac{1}{\sin\varphi}\cdot\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]$$

所以 $\hat{\boldsymbol{L}}$ 及 $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ 与 $\frac{\partial}{\partial r}$ 无关，$[\hat{\boldsymbol{L}},r]=0,[\hat{\boldsymbol{L}}^2,r]=0$

$$(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\cdot\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}=\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{p}}\times\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\right)=\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\left(-\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\times(-\mathrm{i}\hbar\nabla)+\mathrm{i}\hbar\left(\nabla\times\frac{1}{r}\right)\right)=-\frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{r}$$

$$\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\cdot(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})=\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\cdot(2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})=2\mathrm{i}\hbar\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}-\left(\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)\cdot\hat{\boldsymbol{L}}=2\hbar^2\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{r}$$

$$\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\times(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})+(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\times\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}$$

$$=\left[\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\cdot(\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{p}})-\left(\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}\right)\hat{p}_i\right]+\left[\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\left(\hat{p}_i\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\right)-\hat{L}_i\left(\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\right)\right]$$

$$=\frac{1}{r}\hat{r}_j\hat{L}_i\hat{p}_j+(\hat{L}_j\hat{p}_i\hat{r}_j-\hat{L}_i\hat{p}_j\hat{r}_j)\frac{1}{r}$$

$$=\frac{1}{r}(\hat{L}_i\hat{r}_j-\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{r}_k)\hat{p}_j+\hat{L}_j(\hat{r}_j\hat{p}_i-\mathrm{i}\hbar\delta_{ij})\frac{1}{r}-\hat{L}_i(\hat{r}_j\hat{p}_j-\mathrm{i}\hbar\delta_{jj})\frac{1}{r}$$

$$=\frac{1}{r}\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\mathrm{i}\hbar\frac{1}{r}\hat{L}_i-\mathrm{i}\hbar\hat{L}_i\frac{1}{r}-\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\frac{1}{r}+3\mathrm{i}\hbar\hat{L}_i\frac{1}{r}$$

$$=\hat{L}_i\left[\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}},\frac{1}{r}\right]+3\mathrm{i}\hbar\hat{L}_i\frac{1}{r}=\mathrm{i}\hbar\hat{L}_i\left[r\frac{\partial}{\partial r},\frac{1}{r}\right]+3\mathrm{i}\hbar\hat{L}_i\frac{1}{r}=2\mathrm{i}\hbar\frac{\hat{\boldsymbol{L}}}{r}$$

1.77 关于 $\hat{\boldsymbol{L}}, \hat{\boldsymbol{p}}$ 的几个代数关系

题 1.77 证明

$$(\hat{\boldsymbol{L}} \times \hat{\boldsymbol{p}})^2 = (\hat{\boldsymbol{p}} \times \hat{\boldsymbol{L}})^2 = -(\hat{\boldsymbol{L}} \times \hat{\boldsymbol{p}}) \cdot (\hat{\boldsymbol{p}} \times \hat{\boldsymbol{L}}) = \hat{\boldsymbol{L}}^2 \hat{\boldsymbol{p}}^2$$

$$-(\hat{\boldsymbol{p}} \times \hat{\boldsymbol{L}}) \cdot (\hat{\boldsymbol{L}} \times \hat{\boldsymbol{p}}) = \hat{\boldsymbol{L}}^2 \hat{\boldsymbol{p}}^2 + 4\hbar^2 \hat{\boldsymbol{p}}^2$$

$$(\hat{\boldsymbol{L}} \times \hat{\boldsymbol{p}}) \times (\hat{\boldsymbol{L}} \times \hat{\boldsymbol{p}}) = -\mathrm{i}\hbar \hat{\boldsymbol{L}} \hat{\boldsymbol{p}}^2$$

证明 下面用到题 1.72，题 1.73 结论

$$\begin{aligned}
(\hat{\boldsymbol{L}} \times \hat{\boldsymbol{p}})^2 &= (2\mathrm{i}\hbar \hat{\boldsymbol{p}} - \hat{\boldsymbol{p}} \times \hat{\boldsymbol{L}})^2 \\
&= (2\mathrm{i}\hbar)^2 \hat{\boldsymbol{p}} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} + (\hat{\boldsymbol{p}} \times \hat{\boldsymbol{L}})^2 - 2\mathrm{i}\hbar[\hat{\boldsymbol{p}} \cdot (\hat{\boldsymbol{p}} \times \hat{\boldsymbol{L}}) + (\hat{\boldsymbol{p}} \times \hat{\boldsymbol{L}}) \cdot \hat{\boldsymbol{p}}] \\
&= (2\mathrm{i}\hbar)^2 \hat{\boldsymbol{p}} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} + (\hat{\boldsymbol{p}} \times \hat{\boldsymbol{L}})^2 - 2\mathrm{i}\hbar[\hat{\boldsymbol{p}} \cdot (\hat{\boldsymbol{p}} \times \hat{\boldsymbol{L}}) + \hat{\boldsymbol{p}} \cdot (2\mathrm{i}\hbar \hat{\boldsymbol{p}} - \hat{\boldsymbol{p}} \times \hat{\boldsymbol{L}})] \\
&= (\hat{\boldsymbol{p}} \times \hat{\boldsymbol{L}})^2 = (\hat{\boldsymbol{L}} \times \hat{\boldsymbol{p}}) \cdot (2\mathrm{i}\hbar \hat{\boldsymbol{p}} - \hat{\boldsymbol{p}} \times \hat{\boldsymbol{L}}) = -(\hat{\boldsymbol{L}} \times \hat{\boldsymbol{p}}) \cdot (\hat{\boldsymbol{p}} \times \hat{\boldsymbol{L}})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(\hat{\boldsymbol{L}} \times \hat{\boldsymbol{p}})^2 &= (\hat{\boldsymbol{L}} \times \hat{\boldsymbol{p}}) \cdot (\hat{\boldsymbol{L}} \times \hat{\boldsymbol{p}}) = [(\hat{\boldsymbol{L}} \times \hat{\boldsymbol{p}}) \times \hat{\boldsymbol{L}}] \cdot \hat{\boldsymbol{p}} \\
&= [\hat{\boldsymbol{L}} \cdot (\hat{p}_i \hat{\boldsymbol{L}}) - \hat{L}_i (\hat{\boldsymbol{p}} \cdot \hat{\boldsymbol{L}})] \hat{p}_i \\
&= \hat{L}_j \hat{p}_i \hat{L}_j \hat{p}_i = \hat{L}_j (\hat{L}_j \hat{p}_i - \mathrm{i}\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{p}_k) \hat{p}_i = \hat{\boldsymbol{L}}^2 \hat{\boldsymbol{p}}^2
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
-(\hat{\boldsymbol{p}} \times \hat{\boldsymbol{L}}) \cdot (\hat{\boldsymbol{L}} \times \hat{\boldsymbol{p}}) &= -(2\mathrm{i}\hbar \hat{\boldsymbol{p}} - \hat{\boldsymbol{L}} \times \hat{\boldsymbol{p}}) \cdot (\hat{\boldsymbol{L}} \times \hat{\boldsymbol{p}}) \\
&= -2\mathrm{i}\hbar \hat{\boldsymbol{p}} \cdot (2\mathrm{i}\hbar \hat{\boldsymbol{p}} - \hat{\boldsymbol{p}} \times \hat{\boldsymbol{L}}) + (\hat{\boldsymbol{L}} \times \hat{\boldsymbol{p}})^2 \\
&= 4\hbar^2 \hat{\boldsymbol{p}}^2 + \hat{\boldsymbol{L}}^2 \hat{\boldsymbol{p}}^2
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[(\hat{\boldsymbol{L}} \times \hat{\boldsymbol{p}}) \times (\hat{\boldsymbol{L}} \times \hat{\boldsymbol{p}})]_i &= \hat{\boldsymbol{L}} \cdot [\hat{p}_i (\hat{\boldsymbol{L}} \times \hat{\boldsymbol{p}})] - \hat{L}_i [\hat{\boldsymbol{p}} \cdot (\hat{\boldsymbol{L}} \times \hat{\boldsymbol{p}})] \\
&= \hat{L}_j \hat{p}_i (\hat{\boldsymbol{L}} \times \hat{\boldsymbol{p}})_j - \hat{L}_i \hat{\boldsymbol{p}} \cdot (2\mathrm{i}\hbar \hat{\boldsymbol{p}} - \hat{\boldsymbol{p}} \times \hat{\boldsymbol{L}}) \\
&= (\hat{p}_i \hat{L}_j - \mathrm{i}\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{p}_k)(\hat{\boldsymbol{L}} \times \hat{\boldsymbol{p}})_j - 2\mathrm{i}\hbar \hat{L}_i \hat{\boldsymbol{p}}^2 \\
&= \hat{p}_i \hat{\boldsymbol{L}} \cdot (\hat{\boldsymbol{L}} \times \hat{\boldsymbol{p}}) + \mathrm{i}\hbar [\hat{\boldsymbol{p}} \times (\hat{\boldsymbol{L}} \times \hat{\boldsymbol{p}})]_i - 2\mathrm{i}\hbar \hat{L}_i \hat{\boldsymbol{p}}^2 \\
&= \mathrm{i}\hbar [\hat{\boldsymbol{p}} \cdot (\hat{L}_i \hat{\boldsymbol{p}}) - (\hat{\boldsymbol{p}} \cdot \hat{\boldsymbol{L}}) \hat{p}_i] - 2\mathrm{i}\hbar \hat{L}_i \hat{\boldsymbol{p}}^2 \\
&= \mathrm{i}\hbar \hat{p}_j \hat{L}_i \hat{p}_j - 2\mathrm{i}\hbar \hat{L}_i \hat{\boldsymbol{p}}^2 = \mathrm{i}\hbar (\hat{L}_i \hat{p}_j - \mathrm{i}\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{p}_k) \hat{p}_j - 2\mathrm{i}\hbar \hat{L}_i \hat{\boldsymbol{p}}^2 \\
&= -\mathrm{i}\hbar \hat{L}_i \hat{\boldsymbol{p}}^2
\end{aligned}$$

1.78 Schmidt 正交化方案

题 1.78 设属于某能级 E 有三个归一化的简并态 (ψ_1, ψ_2, ψ_3)，彼此线性无关，但不正交. 试找出三个彼此正交归一化的波函数. 它们是否还简并?

解 可以用线性代数中的 Schmidt 正交化方法. 设三个彼此正交的归一化波函数为 e_1, e_2, e_3 不难证明

$$e_1 = \psi_1$$

$$e_2 = \frac{f_2}{|f_2|}$$

$$e_3 = \frac{f_3}{|f_3|}$$

式中：$f_2=\psi_2-(e_1\cdot\psi_2)e_1$，$|f_2|$ 表示 f_2 的模长；$f_3=\psi_3-(e_2\cdot\psi_3)e_2-(e_1\cdot\psi_3)e_1$，$|f_3|$ 表示 f_3 的模长.

因为 e_1,e_2,e_3 是 ψ_1,ψ_2,ψ_3 的线性组合，所以，它们仍简并.

1.79　算符的逆

题 1.79　设 λ 是一个小量，算符 $\hat{A}$ 之逆 $\hat{A}^{-1}$ 存在，求证

$$(\hat{A}-\lambda\hat{B})^{-1}=\hat{A}^{-1}+\lambda\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\lambda^2\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\cdots$$

证明　右边可以表为 $\hat{A}^{-1}\sum\limits_{n=0}^{\infty}\lambda^n(\hat{B}\hat{A}^{-1})^n$，则

$$\begin{aligned}&(\hat{A}-\lambda\hat{B})\hat{A}^{-1}\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n(\hat{B}\hat{A}^{-1})^n\\&=\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n(\hat{B}\hat{A}^{-1})^n-\lambda(\hat{B}\hat{A}^{-1})\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n(\hat{B}\hat{A}^{-1})^n\\&=\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n(\hat{B}\hat{A}^{-1})^n-\sum_{n=1}^{\infty}\lambda^n(\hat{B}\hat{A}^{-1})^n=\lambda^0(\hat{B}\hat{A}^{-1})^0=1\end{aligned}$$

左边 $(\hat{A}-\lambda\hat{B})(\hat{A}-\lambda\hat{B})^{-1}=1$.

1.80　算符的导数

题 1.80　设算符 $\hat{A}(\xi)$ 依赖于一个连续变化的参数 ξ，证明它对 ξ 的导数定义为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\hat{A}(\xi)=\lim_{\varepsilon\to0}\frac{\hat{A}(\xi+\varepsilon)-\hat{A}(\xi)}{\varepsilon}$$

证明　(1) 用微积分中的 Leibniz 法则

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}(\hat{A}\hat{B})&=\lim_{\varepsilon\to0}\frac{\hat{A}(\xi+\varepsilon)\hat{B}(\xi+\varepsilon)-\hat{A}(\xi)\hat{B}(\varepsilon)}{\varepsilon}\\&=\lim_{\varepsilon\to0}\frac{\hat{A}(\xi+\varepsilon)\hat{B}(\xi+\varepsilon)-\hat{A}(\xi+\varepsilon)\hat{B}(\xi)+\hat{A}(\xi+\varepsilon)\hat{B}(\xi)-\hat{A}(\xi)\hat{B}(\xi)}{\varepsilon}\\&=\lim_{\varepsilon\to0}\left[\hat{A}(\xi+\varepsilon)\frac{\hat{B}(\xi+\varepsilon)-\hat{B}(\xi)}{\varepsilon}+\frac{\hat{A}(\xi+\varepsilon)-\hat{A}(\xi)}{\varepsilon}\hat{B}(\xi)\right]\\&=\hat{A}\frac{\mathrm{d}\hat{B}}{\mathrm{d}\xi}+\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}\xi}\hat{B}\end{aligned}$$

(2)

$$0=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}(\hat{A}^{-1}\hat{A})=\frac{\mathrm{d}\hat{A}^{-1}}{\mathrm{d}\xi}\hat{A}+\hat{A}^{-1}\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}\xi}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}(\hat{A}^{-1})=-\hat{A}^{-1}\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}\xi}\hat{A}^{-1}$$

(3)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{O}\xi}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\sum_n\frac{1}{n!}(\mathrm{i}\hat{O}\xi)^n=\sum_n\frac{1}{n!}n\mathrm{i}\hat{O}(\mathrm{i}\hat{O}\xi)^{n-1}=\mathrm{i}\hat{O}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{O}\xi}$$

1.81 Virial 定理的应用

题 1.81 对幂次势$V=\alpha|x|^n$，分别就$\alpha>0$和$\alpha<0$情况，用 Virial 定理讨论存在束缚态时，n 的取值范围.

解 由 Virial 定理$\langle T\rangle=\left\langle\frac{1}{2}x\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle$. 因为幂次势是对称势，只考虑$x>0$的一边.

$\alpha>0$，束缚态存在的条件是$\langle T\rangle\geqslant 0$

$$\langle T\rangle=\frac{n}{2}\alpha\left\langle|x|^n\right\rangle\geqslant 0\Rightarrow n>0$$

$\alpha<0$，束缚态存在的条件是$\langle E\rangle\leqslant 0,\langle T\rangle\geqslant 0$

$$\langle T\rangle=\frac{n}{2}\alpha\left\langle|x|^n\right\rangle\geqslant 0\Rightarrow\langle E\rangle=\langle T+V\rangle=\frac{n+2}{2}\alpha\left\langle|x|^n\right\rangle\leqslant 0\Rightarrow -2<n<0$$

1.82 态随时间的演化

题 1.82 对一个系统，物理量算符$\hat{A}$与$\hat{H}$不对易. 其有本征值为a_1、a_2，相应的本征态为

$$\phi_1=\frac{u_1+u_2}{\sqrt{2}},\qquad \phi_2=\frac{u_1-u_2}{\sqrt{2}}$$

这里u_1、u_2为$\hat{H}$的本征函数，相应的本征值为E_1与E_2，若系统的初态为$\phi_1(t=0)$，证明$\hat{A}$在t时刻的平均值为

$$\left\langle\hat{A}\right\rangle=\frac{a_1+a_2}{2}+\frac{a_1-a_2}{2}\cos\frac{(E_1-E_2)t}{\hbar}$$

证明 设初态

$$\psi(0)=\phi_1=\frac{u_1+u_2}{\sqrt{2}}$$

然后在每个u_j乘上相因子$\exp(-\mathrm{i}\omega_j t),\left(\omega_j=\frac{E_j}{\hbar}\right)$. 即得到$t$时刻的态

$$\psi(t)=\frac{u_1\exp(-\mathrm{i}\omega_1 t)+u_2\exp(-\mathrm{i}\omega_2 t)}{\sqrt{2}}=C_1\frac{u_1+u_2}{\sqrt{2}}+C_2\frac{u_1-u_2}{\sqrt{2}}\tag{1}$$

$$=C_1\phi_1+C_2\phi_2=\frac{1}{2}(\phi_1+\phi_2)\exp(-\mathrm{i}\omega_1 t)+\frac{1}{2}(\phi_1-\phi_2)\exp(-\mathrm{i}\omega_2 t)\tag{2}$$

最后一个表达式是$\psi(t)$用$\hat{A}$的本征态叠加而成. 所以$\hat{A}$的平均值显然是

$$\left\langle\hat{A}\right\rangle=|C_1|^2a_1+|C_2|^2a_2\tag{3}$$

由式(1)、式(2)相等可得

$$C_1+C_2=\exp(-\mathrm{i}\omega_1 t),\qquad C_1-C_2=\exp(-\mathrm{i}\omega_2 t)$$

因此有

$$C_1=\frac{1}{2}[\exp(-\mathrm{i}\omega_1 t)+\exp(-\mathrm{i}\omega_2 t)],\qquad C_2=\frac{1}{2}[\exp(-\mathrm{i}\omega_1 t)-\exp(-\mathrm{i}\omega_2 t)]$$

$$|C_1|^2=\frac{1}{2}[1+\cos(\omega_1-\omega_2)t],\qquad |C_2|^2=\frac{1}{2}[1-\cos(\omega_1-\omega_2)t] \tag{4}$$

将式(4)代入式(3)给出

$$\langle\hat{A}\rangle=\frac{a_1+a_2}{2}+\frac{a_1-a_2}{2}\cos\frac{(E_1-E_2)t}{\hbar}$$

1.83　力学量平均值随时间的演化

题 1.83　设质量为 m 的一维粒子在势场 $V(x)$中运动，其波函数为 $\psi(x,t)$. (1) 证明其位置与动量的平均值的时间演化分别为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle x\rangle=\frac{\langle p\rangle}{m},\qquad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle p\rangle=-\left\langle\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right\rangle$$

(2) 解释上述结果的物理意义.

解　(1) 设 $\hat{A}$ 为某一力学量算符，则

$$\langle\hat{A}\rangle=\int\psi^*\hat{A}\psi\mathrm{d}x$$

若 $\hat{A}$ 不显含时间，则

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{A}\rangle=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\hat{A}\hat{H}-\hat{H}\hat{A}\rangle$$

这里 $\hat{H}$ 为 Hamilton 算符. 令 $\hat{A}=\hat{x}$，则有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{x}\rangle=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\hat{x}\hat{H}-\hat{H}\hat{x}\rangle \tag{1}$$

设 Hamilton 算符为

$$H=\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(\hat{x})$$

故有

$$\hat{x}\hat{H}-\hat{H}\hat{x}=\frac{1}{2m}(\hat{x}\hat{p}^2-\hat{p}^2\hat{x})=-\frac{\hbar\hat{p}}{\mathrm{i}m}$$

代入式(1)得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{x}\rangle=\frac{\langle\hat{p}\rangle}{m} \tag{2}$$

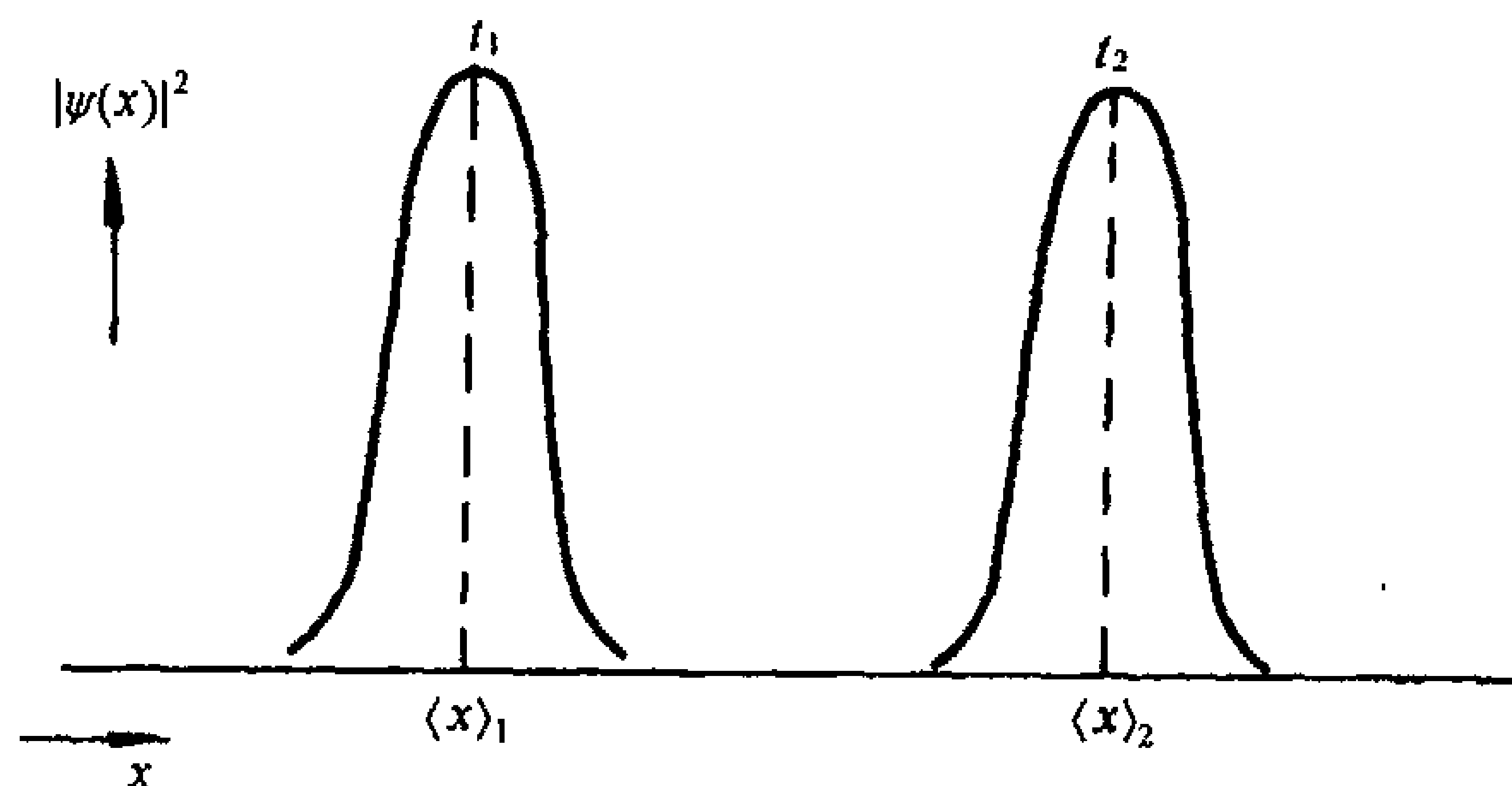
为了证明第二个关系式，令 $\hat{A}=\hat{p}$，我们有

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{p}\rangle&=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle[\hat{p},\hat{H}]\rangle\\&=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle[\hat{p},V(\hat{x})]\rangle\\&=-\int\psi^*\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}V(x)-V(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right]\psi\mathrm{d}x\\&=-\int\psi^*\frac{\mathrm{d}V(x)}{\mathrm{d}x}\psi\mathrm{d}x=-\left\langle\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right\rangle\end{aligned} \tag{3}$$

在上式中用了结果

$$\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}V(x)-V(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right]\psi=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(V\psi)-V\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}=\left(\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right)\psi$$

(2) 式(2)的意义是粒子的速度可以用两种等价的方法计算. 假定我们有一个可用很好的局域的波包表示粒子,在连续的时间 t_1 和 t_2,这个波包的位置如题图 1.83 所示,$\langle x\rangle_1$ 和 $\langle x\rangle_2$ 相应于 t_1 和 t_2 时刻粒子的经典位置，所以速度为 $\dfrac{\langle x\rangle_2-\langle x\rangle_1}{t_2-t_1}$.



题图 1.83

当 t_2-t_1 趋于 0 时，上式趋于 $\dfrac{\mathrm{d}\langle\hat{x}\rangle}{\mathrm{d}t}$. 另外我们还可以由 $\psi(x_1,t)$ 计算动量的平均值

$$\langle\hat{p}\rangle=\int\psi^*\hat{p}\psi\mathrm{d}x$$

然后用 m 相除得到速度的平均值，这两种方法相等.

因为 $F=-\dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}$，所以式(3)说明力的平均值等于动量平均值的变化率. 如果粒子足够局域可以用一个足够窄的波包表示，则算符的平均值相当于观察量的经典极限，即式(3)相当于牛顿第二定律，也是对应原理的一个例子，这就是说当系统可以表示为一个很局域的波函数，量子力学必然产生与经典力学同样的结果. 式(3)即为 Ehrenfest 定理.

第2章　一维定态问题

2.1　自由粒子波包的扩散

题2.1　$\psi(x,t)$是质量为m的自由粒子的一维Schrödinger方程的解. $\psi(x,0)=A\mathrm{e}^{-x^2/a^2}$. (1) 求出$t=0$时，动量空间的概率振幅. (2) 求出$\psi(x,t)$.

解　(1) $\psi(p,0)=\dfrac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar}\psi(x,0)\mathrm{d}x$

$$=\frac{A}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(\frac{-x^2}{a^2}-\frac{\mathrm{i}px}{\hbar}\right)\mathrm{d}x=\frac{Aa}{\sqrt{2\hbar}}\exp\left(-\frac{a^2p^2}{4\hbar^2}\right)$$

(2) 由动量空间 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(p,t)=H\psi(p,t)=\frac{p^2}{2m}\psi(p,t)$$

即

$$\psi(p,t)=B\exp\left(-\frac{\mathrm{i}p^2t}{2m\hbar}\right)$$

由$t=0$时的$\psi(p,0)$知$B=\psi(p,0)$，所以

$$\psi(p,t)=\frac{Aa}{\sqrt{2\hbar}}\exp\left(-\frac{a^2p^2}{4\hbar^2}-\frac{\mathrm{i}p^2t}{2m\hbar}\right)$$

$$\psi(x,t)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(\frac{\mathrm{i}px}{\hbar}\right)\psi(p,t)\mathrm{d}p$$

$$=\frac{Aa}{\sqrt{a^2+2\mathrm{i}\hbar t/m}}\exp\left[-\frac{x^2}{\left(a^2+2\mathrm{i}\hbar t/m\right)}\right]$$

如果我们直接注意到自由空间的波函数可以展开成平面波的线性叠加，则可得到

$$\psi(x,t)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(p,0)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-Ht/\hbar)}\mathrm{d}p$$

$$=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{Aa}{\sqrt{2\hbar}}\exp\left(-\frac{a^2p^2}{4\hbar^2}\right)\exp\left[\mathrm{i}\left(\frac{p}{\hbar}x-\frac{p^2t}{2m\hbar}\right)\right]\mathrm{d}p$$

$$=\frac{Aa}{2\hbar\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{a^2p^2}{4\hbar^2}-\frac{\mathrm{i}p^2t}{2m\hbar}+\frac{\mathrm{i}px}{\hbar}\right)\mathrm{d}p$$

$$=\frac{Aa}{\sqrt{a^2+2\mathrm{i}\hbar t/m}}\exp\left[-\frac{x^2}{\left(a^2+2\mathrm{i}\hbar t/m\right)}\right]$$

与前面结果相同.

2.2 自由粒子运动的普遍解

题 2.2 证明

$$\psi(x,t)=\left(\frac{m}{2\pi it\hbar}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}(x-y)^2m}{2t\hbar}}\psi(y,0)\mathrm{d}y$$

是初条件为$\psi(x,0)$(设为已知)的波包的自由粒子运动普遍解.

证明 将上式代入自由粒子的含时 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)$$

左边为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2t}\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar t}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}(x-y)^2m}{2t\hbar}}\psi(y,0)\mathrm{d}y$$
$$+\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar t}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}(x-y)^2m}{2t\hbar}}\left[\frac{(x-y)^2m}{2t^2}\right]\psi(y,0)\mathrm{d}y$$

又因为

$$\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)=\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar t}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}(x-y)^2m}{2t\hbar}}\left[\frac{\mathrm{i}(x-y)m}{t\hbar}\right]\psi(y,0)\mathrm{d}y$$

所以 Schrödinger 方程的右边应为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar t}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}(x-y)^2m}{2t\hbar}}\left[\left(\frac{\mathrm{i}(x-y)m}{t\hbar}\right)^2+\frac{\mathrm{i}m}{t\hbar}\right]\psi(y,0)\mathrm{d}y$$
$$=\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar t}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}(x-y)^2m}{2t\hbar}}\left[\frac{(x-y)^2m}{2t^2}-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2t}\right]\psi(y,0)\mathrm{d}y$$

比较可知，左边等于右边.

令$\alpha=\dfrac{m}{2\hbar t}$，注意到$\sqrt{-\mathrm{i}}=\dfrac{1}{\sqrt{2}}(1-\mathrm{i})$，有

$$\psi(x,t)=(1-\mathrm{i})\sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(x-y)^2}\psi(y,0)\mathrm{d}y$$

因为$\delta(x-y)=\lim\limits_{\alpha\to\infty}(1-\mathrm{i})\sqrt{\dfrac{\alpha}{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(x-y)^2}$，所以有

$$\psi(x,0)=\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-y)\psi(y,0)\mathrm{d}y=\psi(x,0)$$

2.3 粒子在一维无限深方势阱中的运动

题 2.3 一个质量为 m 的粒子在一维无限深势阱($0\leqslant x\leqslant a$)中运动，$t=0$时刻的初态波函数为

$$\psi(x,0)=\sqrt{\frac{8}{5a}}\left(1+\cos\frac{\pi x}{a}\right)\sin\frac{\pi x}{a}$$

(1) 在后来某一时刻 t_0 的波函数是什么？(2) 体系在 $t=0$ 和 $t=t_0$ 时的平均能量是多少？(3) 在 $t=t_0$ 时，在势阱左半部 $\left(0\leqslant x\leqslant\frac{a}{2}\right)$ 发现粒子的概率是多少？

解　(1) 无穷深方势阱中粒子的定态波函数为 $\left\{\psi_n=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}\right\}$，相应的能量 $E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$.

将 $t=0$ 时刻粒子的初态波函数用这组定态波函数展开

$$\psi(x,0)=\sum_n A_n\psi_n$$

$$\psi(x,0)=A_1\psi_1+A_2\psi_2$$

其中 $A_1=\sqrt{\frac{4}{5}}, A_2=\sqrt{\frac{1}{5}}$

$$\psi(x,0)=\sqrt{\frac{4}{5}}\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a}\right)+\sqrt{\frac{1}{5}}\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{2\pi x}{a}\right)$$

$t=t_0$ 时刻粒子的波函数

$$\begin{aligned}\psi(x,t_0)&=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t_0/\hbar}\psi(x,0)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_1t_0/\hbar}A_1\psi_1+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_2t_0/\hbar}A_2\psi_2\\&=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_1t_0/\hbar}\sqrt{\frac{4}{5}}\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a}\right)+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_2t_0/\hbar}\sqrt{\frac{1}{5}}\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{2\pi x}{a}\right)\end{aligned}$$

(2) $t=0$ 时，$\langle E\rangle=\int\psi^*(x,0)\hat{H}\psi(x,0)\mathrm{d}x=\frac{4}{5}E_1+\frac{1}{5}E_2=\frac{4\pi^2\hbar^2}{5ma^2}$；$t=t_0$ 时，同理可得，能量与 $t=0$ 时相同.

(3)

$$\begin{aligned}&\int_0^{\frac{a}{2}}\psi^*(x,t_0)\psi(x,t_0)\mathrm{d}x\\&=\int_0^{\frac{a}{2}}(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_1t_0/\hbar}A_1\psi_1+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_2t_0/\hbar}A_2\psi_2)^*(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_1t_0/\hbar}A_1\psi_1+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_2t_0/\hbar}A_2\psi_2)\mathrm{d}x\\&=\int_0^{\frac{a}{2}}\left[A_1^2\psi_1^2+A_2^2\psi_2^2+2A_1A_2\psi_1\psi_2\cos\frac{(E_2-E_1)t_0}{\hbar}\right]\mathrm{d}x\\&=\int_0^{\frac{a}{2}}\left(\frac{8}{5a}\sin^2\frac{\pi x}{a}+\frac{2}{5a}\sin^2\frac{2\pi x}{a}+\frac{8}{5a}\sin\frac{\pi x}{a}\sin\frac{2\pi x}{a}\cos\frac{3\pi^2\hbar t_0}{2ma^2}\right)\mathrm{d}x\\&=\int_0^{\frac{a}{2}}\left[\frac{4}{5a}\left(1-\cos\frac{2\pi x}{a}\right)+\frac{1}{5a}\left(1-\cos\frac{4\pi x}{a}\right)+\frac{4}{5a}\left(\cos\frac{\pi x}{a}-\cos\frac{3\pi x}{a}\right)\cos\frac{3\pi^2\hbar t_0}{2ma^2}\right]\mathrm{d}x\\&=\frac{1}{2}+\frac{16}{15\pi}\cos\frac{3\pi^2\hbar t_0}{2ma^2}\end{aligned}$$

2.4 一维盒中的粒子

题 2.4 质量为 m 的粒子处于长为 l 的一维盒子中

$$\begin{cases} V=\infty, & x<0 \\ V=0, & 0<x<l \\ V=\infty, & x>l \end{cases}$$

在 $t=0$ 时刻，该粒子波函数为

$$\psi=\sqrt{\frac{30}{l^5}}x(l-x), \qquad 0<x<l$$

$$\psi=0, \qquad x>l \text{ 或 } x<0$$

求 $\psi(x,t>0)$ 的级数表示式和级数系数的表达式.

解 本征函数和相应的能级分别为

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{l}}\sin\left(\frac{\pi x}{l}n\right), \qquad E_n=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{l}n\right)^2, \qquad n=1,2,3,\cdots$$

而

$$\begin{aligned}\langle n|\psi(t=0)\rangle &= \int_0^l \mathrm{d}x\cdot\sqrt{\frac{2}{l}}\sin\left(\frac{\pi x}{l}n\right)\cdot\sqrt{\frac{30}{l^5}}x(l-x) \\ &= 4\sqrt{15}\left(\frac{1}{n\pi}\right)^3(1-\cos n\pi) \\ &= 4\sqrt{15}\left(\frac{1}{n\pi}\right)^3[1-(-1)^n]\end{aligned}$$

所以

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \sum_{n=1}^{\infty}\langle n|\psi(t=0)\rangle\psi_n(x)\exp\left(-\mathrm{i}\frac{E_n}{\hbar}t\right) \\ &= 8\sum_{n=1}^{\infty}\sqrt{\frac{30}{l}}\cdot\frac{1}{(2n+1)^3\pi^3}\sin\left(\frac{2n+1}{l}\pi x\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\hbar}{2m}\left(\frac{2n+1}{l}\pi\right)^2 t}\end{aligned}$$

2.5 平面转子

题 2.5 自由转子——一个量子“刚体”，具有惯性矩 I_z，自由地在 xy 平面内转动，ϕ 为转角. (1) 找出其能量本征值 E_n 和本征波函数 $\psi_n(\phi)$；(2) 在 $t=0$ 时转子由波包 $\psi(0)=A\sin^2\phi$ 描述，求在 $t>0$ 时的 $\psi(t)$. 此系统的 Hamilton 量为 $H=\frac{J_z^2}{2I_z}$.

解 (1) 写出其 Schrödinger 方程

$$-\frac{\hbar^2}{2I_z}\cdot\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\psi=E\psi$$

解此方程可得

$$\psi(\phi)=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\phi}$$

其中 $k=\dfrac{\sqrt{2I_zE}}{\hbar}$ 利用波函数归一化条件可求出

$$A=\sqrt{\frac{1}{2\pi}}$$

再利用周期边条件 $\psi(2\pi)=\psi(0)$ 可知 k 为整数，故可知：

能量本征态为

$$\psi_n(\phi)=\sqrt{\frac{1}{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}n\phi}$$

能量本征值为

$$E_n=\frac{n^2\hbar^2}{2I_z},\qquad n=0,\pm1,\cdots$$

(2) $t=0$ 时的波函数 $\psi(0)$ 用这一组本征波函数展开

$$\psi(0)=A\sin^2\phi=A\left(\frac{1-\cos2\phi}{2}\right)=\frac{A}{2}-\frac{A}{2}\frac{\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\phi}+\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\phi}}{2}=\frac{A}{2}-\frac{A}{4}(\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\phi}+\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\phi})$$

$$\psi(t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\psi(0)=\frac{A}{2}-\frac{A}{4}[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(-2\phi+2\hbar t/I_z)}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(2\phi+2\hbar t/I_z)}]$$

由归一化条件，$|A|^2\int\sin^4\varphi\mathrm{d}\varphi=1$，有

$$A=\frac{2}{\sqrt{3\pi}}$$

2.6　禁闭在一维盒中电子对器壁的压力

题 2.6　一个电子被禁闭在一维盒子中，并处于基态上. 盒宽 $10^{-10}\mathrm{m}$，电子能量为 38eV. 计算(1) 电子在其第一激发态的能量；(2) 当电子处于基态时盒壁所受的平均力.

解　设盒宽为 a，一维无限深方势阱中，能量本征值为

$$E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

第一激发态

$$E_2=\frac{4\pi^2\hbar^2}{2ma^2}=4E_1=4\times38=152(\mathrm{eV})$$

(2) 利用 Hellmann-Feynman 定理

$$\frac{\mathrm{d}E_n(\lambda)}{\mathrm{d}\lambda}=\int\psi_n^*(x)\frac{\partial\hat{H}(x,\lambda)}{\partial\lambda}\psi_n(x)\mathrm{d}x=\left\langle\frac{\partial\hat{H}(x,\lambda)}{\partial\lambda}\right\rangle$$

$$\langle F\rangle=\left\langle-\frac{\partial\hat{V}}{\partial a}\right\rangle=\left\langle-\frac{\partial\hat{H}}{\partial a}\right\rangle=-\frac{\mathrm{d}E_1}{\mathrm{d}a}=-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}a}\left(\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\right)$$

$$=\frac{\pi^2\hbar^2}{ma^3}=\frac{2}{a}\cdot\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}=7.6\times10^9(\mathrm{cm}^{-1}\cdot\mathrm{eV})$$

2.7 半壁无限高方势阱

题 2.7 考虑质点在下列势中运动的一维问题

$$\begin{cases} V=\infty, & x<0 \\ V=0, & 0\leqslant x\leqslant a \\ V=V_0, & x>a \end{cases}$$

(1) 证明束缚态能级由方程 $\tan(\sqrt{2mE}a/\hbar)=[E/(V_0-E)]^{1/2}$ 给出；(2)不进一步求解，大致画出基态波函数的形状.

解 (1) Schrödinger 方程

$0\leqslant x\leqslant a$ 时

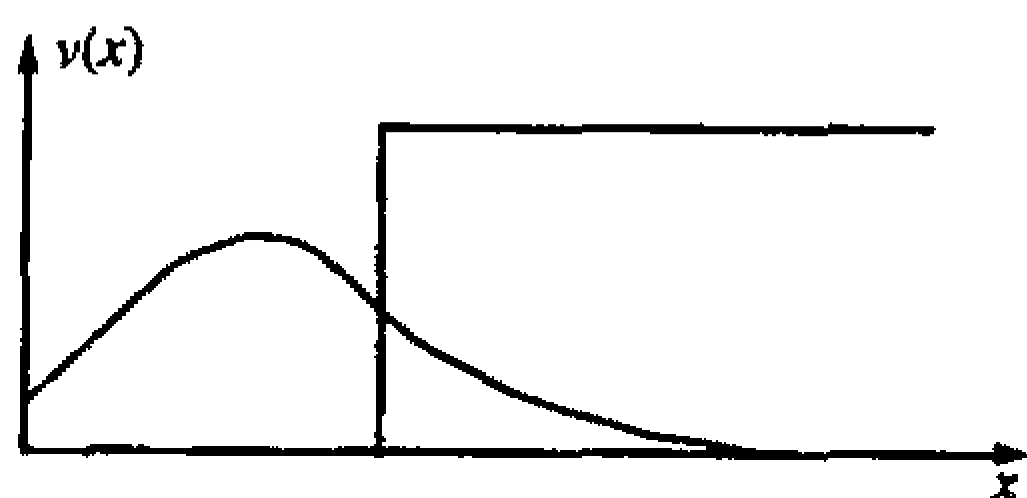
$$\psi''+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi=0$$

$x>a$ 时

$$\psi''+\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\psi=0$$

边界条件：$x=0$ 时 $\psi=0$, $x\to+\infty$ 时 $\psi\to 0$. 合乎条件的解：$0\leqslant x\leqslant a$ 时 $\psi=\sin(\sqrt{2mE}x/\hbar)$；$x>a$ 时 $\psi=A\mathrm{e}^{-\sqrt{2m(V_0-E)}x/\hbar}$. 由 $(\ln\psi)'$ 在 $x=a$ 处的连续性可得 $\tan(\sqrt{2mE}a/\hbar)=[E/(V_0-E)]^{1/2}$.

(2) 基态波函数的形状如题图 2.7 所示.



题图 2.7

2.8 $H=H_0+\dfrac{\lambda}{m}p$ 的求解

题 2.8 在势 $V(x)$ 中作一维运动的粒子，其运动决定于 Hamilton 量 $H_0=\dfrac{p^2}{2m}+V(x)$，其中 $p=-\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ 为动量算子. 设 $E_n^0, n=1,2,\cdots$ 为 H_0 的本征值，现考虑 Hamilton 量 $H=H_0+\dfrac{\lambda}{m}p$. λ 为参数. 给定 λ、m 和 E_n^0，求 H 的本征值.

解 新 Hamilton 量为

$$H=H_0+\frac{\lambda}{m}p=\frac{p^2}{2m}+\frac{\lambda}{m}p+V(x)$$

$$= \frac{(p+\lambda)^2}{2m} + V(x) - \frac{\lambda^2}{2m}$$

新波函数ψ与旧波函数$\psi^{(0)}$间的关系为

$$\psi = \psi^{(0)} e^{-i\lambda z/\hbar}$$

其相应的本征值为

$$E_n = E_n^0 - \frac{\lambda^2}{2m}$$

2.9　一维束缚态的逆(反散射)问题(1)

题 2.9　粒子在一维势场中运动，其束缚定态波函数为

(1) $\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{15}{16a^5}}(a^2 - x^2), & |x| \leqslant a \\ 0, & |x| > a \end{cases}$

(2) $\psi(x) = \sqrt{\alpha} e^{-\alpha|x|}$, $-\infty < x < \infty$

(3) $\psi(x) = \sqrt{2\alpha^3} x e^{-\alpha|x|}$, $-\infty < x < \infty$

求粒子相应的能级及势场$V(x)$.

解　这是一维束缚定态的逆问题，亦称为“反散射”问题. 由

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi_E(x) = E\psi_E(x)$$

则有

$$V(x) = E + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi_E(x)}\cdot\frac{d^2}{dx^2}\psi_E(x), \qquad -\infty < x < \infty \tag{1}$$

如果给定一个定态波函数$\psi_E(x)$，则由式(1)可给出$V(x)-E$，欲分别求出E和$V(x)$，还需要附加条件，例如设定$V(x)$的零点.

(1) 对于

$$\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{15}{16a^5}}(a^2 - x^2), & |x| \leqslant a \\ 0, & |x| > a \end{cases}$$

由式(1)有

$$V(x) = \begin{cases} E + \dfrac{\hbar^2}{m(x^2 - a^2)}, & |x| \leqslant a \\ \infty, & |x| > a \end{cases}$$

取$x=0$处$V(x)=0$，得

$$E=\frac{\hbar^2}{ma^2},\qquad V(x)=\begin{cases}\dfrac{\hbar^2}{ma^2}\dfrac{x^2}{x^2-a^2}, & |x|\leqslant a\\ \infty, & |x|>a\end{cases}$$

(2) 利用 $\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}|x|=2\delta(x)$ 及

$$\psi(x)=\sqrt{\alpha}\mathrm{e}^{-\alpha|x|},\qquad -\infty<x<\infty$$

有

$$V(x)=E+\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}-\frac{\hbar^2\alpha}{m}\delta(x)$$

得到

$$E=-\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m},\qquad V(x)=-\frac{\hbar^2\alpha}{m}\delta(x)$$

(3) $\psi(x)=\sqrt{2\alpha^3}x\mathrm{e}^{-\alpha|x|},-\infty<x<\infty$，则

$$V(x)=E+\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}-\frac{\hbar^2\alpha}{m}\left[\frac{1}{|x|}+\delta(x)\right]$$

得到

$$E=-\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m},\qquad V(x)=-\frac{\hbar^2\alpha}{m}\left[\frac{1}{|x|}+\delta(x)\right]$$

2.10 一维束缚态的逆(反散射)问题(2)

题 2.10 一维运动粒子处于能量本征态 $\psi(x)=A x\mathrm{e}^{-\frac{\alpha^2x^2}{2}}$，求粒子所处的势场.

解 由 $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)+V(x)\psi(x)=E\psi(x)$，有

$$V(x)=E+\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\psi''}{\psi}$$

可得

$$V(x)=E-\frac{3\alpha^2\hbar^2}{2m}+\frac{\hbar^2\alpha^4x^2}{2m}$$

若令 $V(0)=0$，则

$$E=\frac{3\alpha^2\hbar^2}{2m},\qquad V(x)=\frac{\hbar^2\alpha^4x^2}{2m}$$

2.11 一维束缚态的逆(反散射)问题(3)

题 2.11 考虑如下一维波函数

$$\psi(x)=A\left(\frac{x}{x_0}\right)^n\mathrm{e}^{-x/x_0}$$

其中 A, n 与 x_0 为常数. (1) 利用 Schrödinger 方程，求位势 $V(x)$ 和能量 E，对于它们，该波函数为一本征函数(假设当 $x\to\infty$ 时，$V(x)\to 0$). (2) 在你看来该势与轨道角动量为 l 的氢原子态的有效径向势有何联系？

解　(1) 定态 Schrödinger 方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\right]\psi(x)=E\psi(x)$$

由题中波函数得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi(x)=A\frac{n}{x_0}\left(\frac{x}{x_0}\right)^{n-1}\mathrm{e}^{-x/x_0}+A\left(\frac{x}{x_0}\right)^n\left(-\frac{1}{x_0}\right)\mathrm{e}^{-x/x_0}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)=A\frac{n(n-1)}{x_0^2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^{n-2}\mathrm{e}^{-x/x_0}$$

$$-2A\frac{n}{x_0^2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^{n-1}\mathrm{e}^{-x/x_0}+A\frac{1}{x_0^2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^n\mathrm{e}^{-x/x_0}$$

$$=\left[\frac{n(n-1)}{x^2}-2\frac{n}{x_0x}+\frac{1}{x_0^2}\right]\psi(x)$$

由定态 Schrödinger 方程，两边消去 $\psi(x)$，得

$$E-V(x)=-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{n(n-1)}{x^2}-\frac{2n}{x_0x}+\frac{1}{x_0^2}\right]$$

当 $x\to\infty$，$V(x)\to 0$，因此

$$E=-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{1}{x_0^2}$$

势 $V(x)$ 为

$$V(x)=-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{n(n-1)}{x^2}-\frac{2n}{xx_0}\right]$$

(2) 氢原子有效势为

$$-\frac{e^2}{r}+\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{l(l+1)}{r^2}$$

故 $V(x)$ 中正比于 x^{-2} 的项与氢原子势中正比于 r^{-2} 的项形式相同，$V(x)$ 中正比于 x^{-1} 的项与 n 有关，而氢原子势中库仑项却与 l 无关，这是两者的区别.

2.12　一维束缚态的逆(反散射)问题(4)

题 2.12　设波函数 $\psi(x)=A\left(\frac{x}{a}\right)^n\mathrm{e}^{-\frac{x}{a}}$ 是一维势 $V(x)$ 中的能量本征态，其中 A, n, a 为常数，当 $x\to 0$ 时，$V(x)\to 0$，求粒子能量和 $V(x)$.

解　由 $-\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi''(x)+V(x)\psi(x)=E\psi(x)$ 有

$$V(x)=\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{\psi''(x)}{\psi(x)}+E$$

将$\psi(x)$代入上式有

$$V(x)=\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[n(n-1)x^{-2}-\frac{2n}{a}x^{-1}+\frac{1}{a^2}\right]+E$$

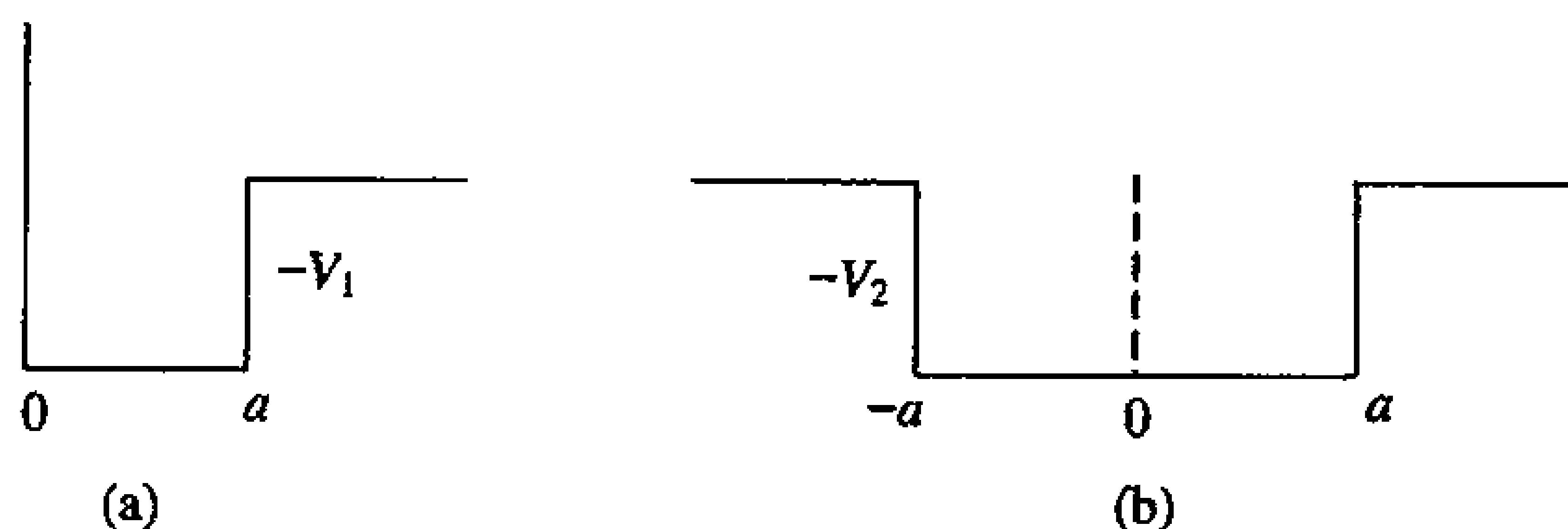
由于$x\to 0$时，$V(x)\to 0$，因此

$$E=-\frac{1}{a^2}$$

$$V(x)=\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[n(n-1)x^{-2}-\frac{2n}{a}x^{-1}\right]$$

2.13 半壁无限深和有限深对称方势阱存在束缚态的条件

题 2.13 考虑下列一维势阱(题图 2.13(a)和题图 2.13(b)). (1) 对任意小的阱深V_i，每个阱能有一个束缚态吗？定性解释之. (2) 对于$V_1=V_2$，两阱束缚态能量之间的关系是什么？(3) 对给定能量的连续态，每个阱可有多少个独立解？(4)定性解释，怎样才能有这样一些束缚态，比起在阱内来，它们更像是在阱外.



题图 2.13

解 (1)和(2)两小题的解此处略.

(3) 对能量E给定的连续态，阱(a)仅有一个独立解，即在$x=0$处ψ为零的“驻波”解，阱(b)有两个独立解，对应于沿x轴正向和负向传播的两个“行波”解.

(4) 这等价于要求(以奇宇称解为例)

$$1>\frac{\text{处于阱内的概率}}{\text{处于阱外的概率}}=\frac{\int_0^a A^2\sin^2 kx\mathrm{d}x}{\int_a^\infty B^2\mathrm{e}^{-2k'x}\mathrm{d}x}$$

$$=\frac{A^2}{B^2}\cdot\frac{k'a}{\mathrm{e}^{-2k'a}}\left(1-\frac{\sin 2ka}{2ka}\right)=\left(\frac{\mathrm{e}^{-\eta}}{\sin\xi}\right)^2\frac{\eta}{\mathrm{e}^{-2\eta}}\left(1-\frac{\sin 2\xi}{2\xi}\right)=\frac{\eta\left(1-\frac{\sin 2\xi}{2\xi}\right)}{\sin^2\xi}$$

式中$\frac{A}{B}=\frac{\mathrm{e}^{-\eta}}{\sin\xi}$是在$x=a$处波函数连续条件给出的，$\xi=ka,\eta=k'a,k'=\left(\frac{-2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2}$，$k=\left(\frac{2m(V_i+E)}{\hbar^2}\right)^{1/2}$.

描述 Schrödinger 方程的本征值解的下列方程组

$$\begin{cases} -\xi\cot\xi = \eta \\ \xi^2+\eta^2 = \dfrac{2mV_i}{\hbar^2}a^2 \end{cases}$$

当

$$\frac{2mV_ia^2}{\hbar^2} \to \left[\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi\right]^2, \qquad n=0,1,2,\cdots$$

时，有解

$$\begin{cases} \xi = \sqrt{\dfrac{2mV_i}{\hbar^2}}a = \left(n+\dfrac{1}{2}\right)\pi \\ \eta = 0 \end{cases}$$

代入上面概率比值的表达式中，可知这时

$$\frac{\eta}{\sin^2\xi}\left(1-\frac{\sin 2\xi}{2\xi}\right) \to 0$$

故只需要

$$V_ia^2 \to \frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi\right]^2, \qquad n=0,1,2,\cdots$$

就会有所要求的情况出现.

2.14　δ 势阱的束缚态

题 2.14　质量为 m 的粒子处在一维短程势 $V(x)=-V_0\delta(x)$ 中，求束缚能.

解　Schrödinger 方程

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2}{dx^2}-V_0\delta(x)\right)\psi(x)=E\psi(x), \qquad E<0 \tag{1}$$

在离开原点处，Schrödinger 方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)=E\psi(x)$$

解为

$$\begin{cases} \psi_{\text{I}} = Ae^{kx}, & x<0 \\ \psi_{\text{II}} = Ae^{-kx}, & x>0 \end{cases} \qquad k^2=-\frac{2mE}{\hbar^2}$$

在原点附近 $(-\varepsilon,\varepsilon)$ 积分式(1)，并取极限 $\varepsilon\to 0$

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2}{dx^2}+V_0\delta(x)\right)\psi(x)dx=\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}E\psi(x)dx$$

于是得

$$\lim_{\varepsilon\to 0}[\psi'(+\varepsilon)-\psi'(-\varepsilon)]+\frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi(0)=0$$

$$\lim_{\varepsilon\to 0}[-Ake^{-k\varepsilon}-Ake^{-k\varepsilon}]+\frac{2mV_0}{\hbar^2}A=0$$

得

$$k=\frac{mV_0}{\hbar^2}$$

由于$k^2=-\dfrac{2mE}{\hbar^2}$，所以

$$E=-\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}$$

2.15　δ势阱的束缚态中，使粒子处于$|x|<x_0$的概率为 1/2 的x_0值

题2.15　质量为m的非相对论粒子在势$V(x)=-\alpha\delta(x)$内作一维运动. 粒子处于束缚态. 求x_0值，使得粒子处于$|x|<x_0$的概率为$\dfrac{1}{2}$.

解　束缚态$E<0$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}-\alpha\delta(x)\right]\psi(x)=E\psi(x) \tag{1}$$

$\lim\limits_{\varepsilon\to 0^+}\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\mathrm{d}x$，得

$$\psi'(0^+)-\psi'(0^-)=-\frac{2m}{\hbar^2}\alpha\psi(0) \tag{2}$$

由(1)，考虑到$x=\pm\infty$处的有限性，得

$$\psi(x)=\begin{cases}Ae^{kx}, & x<0\\ Be^{-kx}, & x>0\end{cases}\qquad k=\sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2}E}$$

代入(2)得

$$k=\frac{ma}{\hbar^2}$$

所以

$$\psi(x)=A\exp\left(-ma\frac{|x|}{\hbar^2}\right)$$

$$\begin{aligned}P(|x|<x_0)&=2|A|^2\int_0^{x_0}\exp\left(-2ma\frac{x}{\hbar^2}\right)\mathrm{d}x\\&=2|A|^2\times\frac{\hbar^2}{2ma}\left[1-\exp\left(-2m\frac{ax_0}{\hbar^2}\right)\right]\\&=\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x)|^2\mathrm{d}x\\&=\frac{1}{2}\times 2|A|^2\frac{\hbar^2}{2ma^2}\end{aligned}$$

得

$$1-\exp\left(-2m\frac{ax_0}{\hbar^2}\right)=\frac{1}{2}$$

所以

$$x_0=\frac{\hbar^2}{2ma}\ln 2$$

2.16　$V(x)=\begin{cases}V_0\delta(x), & -a<x<\infty\\ \infty, & x<-a\end{cases}$

题 2.16　对一质量为 m 的粒子，有一个一维量子力学势能，如题图 2.16 所示

$$V(x)=\begin{cases}V_0\delta(x), & -a<x<\infty\\ \infty, & x<-a\end{cases}$$

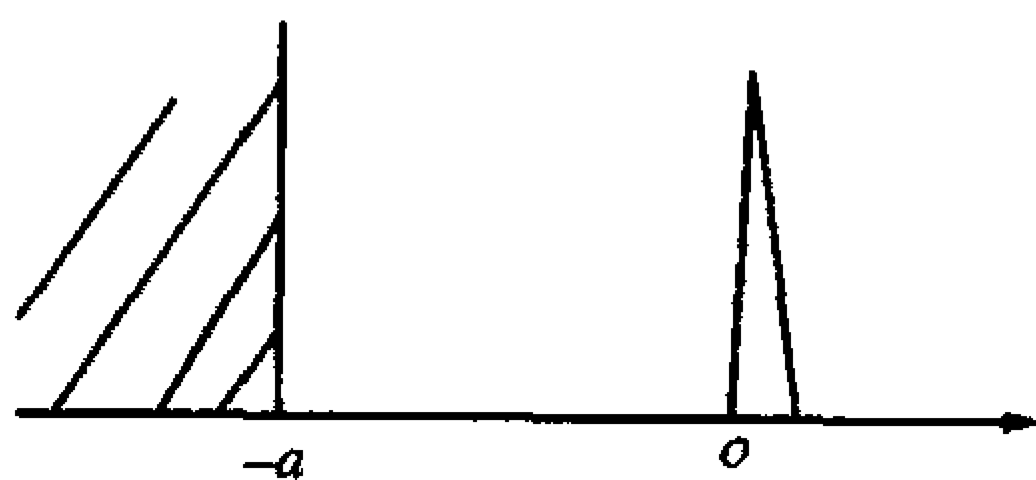
$\left(\text{定义如下量，} k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}},\ \alpha=\frac{2mV}{\hbar^2}\right)$ 在 $t=0$ 时，粒子波函数完全禁闭在 $-a<x<0$ 的区域中. (1) 写出 $t=0$ 时粒子最低能量的归一化波函数. (2) 给出能量本征函数

$$\psi_k(x)=\psi_k^{\mathrm{I}}(x),\qquad \psi_k(x)=\psi_k^{\mathrm{II}}(x)$$

所必须满足的边界条件. 其中两区域为(I) $-a<x<0$ 及(II) $x\geqslant 0$. (3) 求两区中满足边界条件的能量本征波函数(实数的)解，准确到一个常因子. (4) $t=0$ 时的波函数 $\psi(x)$ 可表示为能量本征波函数 $\psi_k(x)$ 的积分

$$\psi(x)=\int_{-\infty}^{+\infty}f(k)\psi_k(x)\mathrm{d}k$$

指明怎样从解 $\psi_k(x)$ 确定 $f(k)$. (5) 利用 $f(k)$ 给出一个波函数随时间演变的表达式. 经过长时间后，k 的什么值支配着时间过程？



题图 2.16

解　(1) 要找的波函数 $\psi(x)$ 满足边界条件 $\psi(-a)=\psi(0)=0$. 对满足这两个边界条件并定义在 $-a<x<0$ 中的函数类，有如下一组正交、归一、完备基

$$\phi_n(x)=\begin{cases}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi nx}{a}\right), & -a<x<0\\ 0, & \text{其他}\end{cases}$$

这里 $n=1,2,\cdots$. 它们在 $[-a, 0]$ 内满足 Schrödinger 方程，并且

$$\langle\phi_n|H|\phi_m\rangle=E_n\delta_{mn},\qquad E_n=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2$$

所求的归一化的最低能量波函数为

$$\psi(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\left(\dfrac{\pi x}{a}\right), & -a<x<0\\ 0, & \text{其他}\end{cases}$$

(2) 这时的 Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi+V_0\delta(x)\psi=E\psi$$

或

$$\psi''(x)+k^2\psi(x)=a\delta(x)\psi(x)$$

边界条件为

$$\psi^{\mathrm{I}}(-a)=0,\qquad \psi^{\mathrm{I}}(0)=\psi^{\mathrm{II}}(0),\qquad \psi^{\mathrm{III}}(+\infty)=\text{有限}$$

$$\psi^{\mathrm{II}\prime}(0)-\psi^{\mathrm{I}\prime}(0)=a\psi^{\mathrm{I}}(0)$$

最后一个关于导数不连续的条件是将 Schrödinger 方程对包含 $x=0$ 点的小区间 $[-\varepsilon,\varepsilon]$ 积分，令 $\varepsilon\to 0$ 取极限而得.

(3) 满足(2)中方程和边界条件的解为

$$\psi_k(x)=\begin{cases}\psi_k^{\mathrm{I}}(x)=c_k\sin k(x+a), & -a<x<0\\ \psi_k^{\mathrm{II}}(x)=c_k\sin k(x+a)+A_k\sin kx, & x>0\\ 0, & x<-a\end{cases}$$

由(2)中边界条件可得

$$A_k=\frac{a}{k}\sin ka,\qquad c_k=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\left[1+\left(\frac{a\sin ka}{k}\right)^2+\frac{a\sin 2ka}{k}\right]^{-1/2}$$

(4) 将 $t=0$ 时的波函数 $\psi(x)$ 按上面 $\psi_k(x)$ 展开

$$\psi(x)=\int_{-\infty}^{+\infty}f(k)\psi_k(x)\mathrm{d}k$$

$$\int_{-a}^{+\infty}\psi_{k'}^{*}(x)\psi(x)\mathrm{d}x=\iint f(k)\psi_k(x)\psi_{k'}^{*}(x)\mathrm{d}k\mathrm{d}x$$

$$=\int_{-\infty}^{+\infty}f(k)\delta(k-k')\mathrm{d}k=f(k')$$

或

$$f(k)=\int_{-a}^{+\infty}\psi_k^{*}(x)\psi(x)\mathrm{d}x$$

(5) 由于

$$\psi(x)=\psi(x,0)=\int_{-\infty}^{+\infty}f(k)\psi_k(x)\mathrm{d}k$$

所以

$$\psi(x,t)=\int_{-\infty}^{+\infty}f(k)\psi_k(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_kt/\hbar}\mathrm{d}k$$

在 $t=0$ 时，粒子处于宽为 a 的无限深方势阱的基态上，是个波包. 当 $t>0$ 时，由于 $\delta(x)$ 势垒的可穿透性，总趋势是波包要弥散到 $x>0$ 区域. 为具体研究起见，先计算 $f(k)$

$$f(k)=\int_{-a}^{0}c_k\sin k(x+a)\cdot\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a}\mathrm{d}x$$

$$=\sqrt{\frac{1}{2a}}\int_{-a}^{0}c_k\left\{\cos\left[\left(k-\frac{\pi}{a}\right)x+ka\right]-\cos\left[\left(k+\frac{\pi}{a}\right)x+ka\right]\right\}\mathrm{d}x$$

$$=\frac{\pi}{a}\sqrt{\frac{2}{a}}\frac{\sin ka}{k^2-\left(\frac{\pi}{a}\right)^2}c_k$$

$$\psi(x,t)=\frac{\pi}{a}\sqrt{\frac{2}{a}}\int_{-\infty}^{+\infty}c_k\frac{\sin ka}{k^2-\left(\frac{\pi}{a}\right)^2}\begin{Bmatrix}\sin k(x+a)\\ \sin k(x+a)+\frac{a}{k}\sin ka\sin kx\end{Bmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_kt/\hbar}\mathrm{d}k$$

这里 $E_k=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$. 大括号中取上一行还是下一行要视等式的 x 取值在哪个区域中而定.

当 $t\to\infty$ 时，振动因子 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_kt/\hbar}$ 无限加快，而积分号下其余函数关于 k 是正规的($k=\pi/a$ 并非极点)，因此对任何给定的 x 值，积分所得的 $\psi(x,t)$ 均趋于零. 显然，当 t 很大时，小波数 k 的成分起主要作用，此时粒子实际上已"逃离" $[-a,0]$ 区域.

2.17　一维束缚态逆问题

题 2.17　处于一维势 $V(x)$ 中的一个质量为 M 的粒子，其波函数由下式给出

$$\psi(x,t)=\begin{cases}\alpha x\mathrm{e}^{-\beta x}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma t/\hbar}, & x>0\\ 0, & x<0\end{cases}$$

其中 α 、β 和 γ 都是正常数. (1) 粒子处于束缚态吗？为什么？ (2) 测量到粒子的总能量为 E 的概率密度 $\rho(E)$ 等于多少？(3) 用已知的量求出 $V(x)$ 的最低能量本征值.

解　该粒子处于束缚态. 因为其波函数在无穷远处为零 $\lim\limits_{x\to-\infty}\psi(x,t)=0$

$$\lim_{x\to-\infty}\psi(x,t)=\lim_{x\to-\infty}\alpha x\mathrm{e}^{-\beta x}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma t/\hbar}x=0,\qquad \beta>0$$

将 $x>0$ 时的波函数 $\psi(x,t)=\alpha x\mathrm{e}^{-\beta x}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma t/\hbar}$ 代入 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\cdot\frac{\partial}{\partial x^2}+V(x)\right]\psi(x,t)$$

则得

$$-\gamma x=-\frac{\hbar^2}{2M}(\beta^2x-2\beta)+V(x)x$$

由此可解出 $x>0$ 时的势

$$V(x)=-\gamma+\frac{\hbar^2}{2M}\left(\beta^2-\frac{2\beta}{x}\right)$$

现在求势 $V(x)$ 作用下粒子的定态波函数. $\psi_E(x)$ 满足方程

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}-\beta^2+\frac{2\beta}{x}\right)\psi_E(X)=(E+\gamma)\psi_E(X),\qquad x>0$$

即

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi_E(x)}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2M}{\hbar^2}\left[\left(E+\gamma-\frac{\beta^2\hbar^2}{2M}\right)+\frac{\beta\hbar^2}{M}\frac{1}{x}\right]\psi_E(x)=0$$

若令

$$E'=E+\gamma-\frac{\beta^2\hbar^2}{2M},\qquad e^2=\frac{\beta\hbar^2}{M}$$

则以上方程化为

$$\frac{d^2\psi_E(x)}{dx^2}+\frac{2M}{\hbar^2}\left(E'+\frac{e^2}{x}\right)\psi_E(x)=0,\qquad x>0$$

注意到$\psi_E(x)\xrightarrow{x\to 0}0$，即知上式为$l=0$的氢原子径向波函数$\chi_{n0}(x)=xR_{n0}(x)$所满足的方程. 这里相应的 Bohr 半径为

$$\alpha=\frac{\hbar^2}{Me^2}=\frac{1}{\beta}$$

而能级为

$$E_n'=-\frac{Me^4}{2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2}=-\frac{\beta^2\hbar^2}{2M}\cdot\frac{1}{n^2},\qquad n=1,2,\cdots$$

所以

$$E_n=-\gamma+\frac{\beta^2\hbar^2}{2M}\left(1-\frac{1}{n^2}\right),\qquad n=1,2,\cdots$$

所以，最低的能量本征值为

$$E_1=-\gamma$$

容易看出粒子的波函数$\psi(x,t)=\alpha x\mathrm{e}^{-\beta x}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma t/\hbar}\propto\psi_{E_1}(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_1t/\hbar}$，所以

$$\rho(E)=\begin{cases}1, & E=-\gamma\\ 0, & E\neq-\gamma\end{cases}$$

2.18　$V(x)=-\alpha\delta(x)+V',\qquad V'=\begin{cases}0, & x<0\\ V_0, & x>0\end{cases}$

题 2.18　质量为μ的粒子在一维势场

$$V(x)=-\alpha\delta(x)+V',\qquad V'=\begin{cases}0, & x<0\\ V_0, & x>0\end{cases}$$

中运动，其中α与V_0均为实数. (1) 试给出存在束缚态的条件，并给出其能量本征值和相应的本征函数. (2) 给出粒子处于$x>0$区域中的概率，它是大于 1/2，还是小于 1/2，为什么？

解　在此势场中的束缚定态能量$E<0$，令

$$E=-|E|,\qquad \beta=\sqrt{\frac{2\mu|E|}{\hbar^2}},\qquad \gamma=\sqrt{\frac{2\mu(V_0+|E|)}{\hbar^2}} \tag{1}$$

不包括 $x=0$ 点的定态方程为

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2}=\beta^2\psi(x),\qquad x<0$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2}=\gamma^2\psi(x),\qquad x>0 \tag{2}$$

$\psi(x)$ 满足条件

$$\psi(0^+)=\psi(0^-),\qquad \psi(\pm\infty)=0 \tag{3}$$

$$\psi'(0^+)-\psi'(0^-)=-\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}\psi(0) \tag{4}$$

方程(2)满足条件(3)的解为

$$\psi(x)=\begin{cases}A\mathrm{e}^{\beta x}, & x<0\\ A\mathrm{e}^{-\gamma x}, & x>0\end{cases} \tag{5}$$

将式(5)代入式(4)中得

$$\gamma+\beta=\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}$$

或者

$$\sqrt{\frac{2\mu(V_0+E)}{\hbar^2}}=\frac{2\mu a}{\hbar^2}-\sqrt{\frac{2\mu|E|}{\hbar^2}} \tag{6}$$

式(6)两边平方，得

$$\sqrt{\frac{2\mu|E|}{\hbar^2}}=\frac{1}{2\alpha}\left(\frac{2\mu\alpha^2}{\hbar^2}-V_0\right) \tag{7}$$

显然 $|E|$ 有解的条件是

$$\frac{2\mu\alpha^2}{\hbar^2}>V_0,\quad 或\quad \alpha^2>\frac{\hbar^2V_0}{2\mu}$$

这正是存在束缚态的条件. 由式(7)得

$$|E|=\frac{\hbar^2}{8\mu\alpha^2}\left(\frac{2\mu\alpha^2}{\hbar^2}-V_0\right)^2 \tag{8}$$

即

$$E=-\frac{\hbar^2}{8\mu\alpha^2}\left(\frac{2\mu\alpha^2}{\hbar^2}-V_0\right)^2$$

相应的波函数如式(5)所得，其中 β 与 γ 是由式(1)与式(8)决定的已知量. 常数 A 由归一化条件确定为

$$A=\left(\frac{2\beta\gamma}{\beta+\gamma}\right)^{1/2}$$

粒子处于 $x>0$ 区的概率为

$$|A|^2\int_0^{\infty} e^{-\gamma x}dx=\frac{\beta}{\beta+\gamma}<\frac{1}{2}$$

这是因为$\beta>0,\gamma>0,\beta<\gamma$.

2.19 $V(x)=\begin{cases}\infty, & x<0,x>a\\ \alpha\delta(x-a/2), & 0<x<a\end{cases}$

题 2.19 一个质量为μ的粒子在一维势场

$$V(x)=\begin{cases}\infty, & x<0,\ x>a\\ \alpha\delta(x-a/2), & 0<x<a\end{cases}$$

其中，α和a为正的常数，求第一激发态能量，并讨论$a\to 0$时的定态能量.

解 在$x<0,x>a$区，$\psi(x)=0$. 在$0<x<a$区，$\psi(x)$满足方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\alpha\delta\left(x-\frac{a}{2}\right)\psi(x)=E\psi(x) \tag{1}$$

及条件

$$\psi(0)=0,\qquad \psi(a)=0,\qquad \psi\left(\frac{a^+}{2}\right)=\psi\left(\frac{a^-}{2}\right) \tag{2}$$

$$\psi'\left(\frac{a^+}{2}\right)-\psi'\left(\frac{a^-}{2}\right)=\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}\psi\left(\frac{a}{2}\right) \tag{3}$$

方程(1)的一般解为

$$\begin{aligned}&\psi_1(x)=A\sin(kx+\varphi_1), && 0<x<a/2\\ &\psi_2(x)=B\sin(kx+\varphi_2), && a/2<x<a\end{aligned} \tag{4}$$

其中$k=\sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}$. 如果$\alpha=0$，则$V(x)$变为宽为$a$的无限深方势阱. 这时条件(3)变为

$$\psi'\left(\frac{a^+}{2}\right)-\psi'\left(\frac{a^-}{2}\right)=0 \tag{5}$$

对$\alpha=0$的无限深方势阱，波函数的一般解也是式(4)，但波函数满足的条件是式(2)与式(5). $\alpha=0$和$\alpha\neq 0$两种情况的唯一差别是$\psi'(x)$在$x=a/2$处波函数的值为0，则$\alpha\neq 0$对应的条件(3)就变成了$\alpha=0$的条件(5)，$\psi'(x)$在$x=a/2$处是连续的. 这样的波函数就成为两种势阱中的定态波函数. 我们可以检验无限深方势阱的定态波函数

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{\alpha},\qquad n=1,2,3,\cdots$$

看其中是否有满足条件$\psi_n(a/2)=0$的. 显然$n=2,4,6,\cdots$的$\psi_n(x)$满足这个条件，他们也是$\alpha\neq 0$的势阱中的定态波函数. 因此本题的一部分解是

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{\alpha},\qquad E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2},\qquad n=2,4,\cdots$$

另一部分解由方程(2)的一般解式(4)与条件(2)，条件(3)得到，将式(4)代入条件(3)得$\varphi_1=0,\varphi_2=-ka,B=-A$. 于是

$$\psi_1(x) = A\sin kx, \qquad 0 < x < a/2$$
$$\psi_2(x) = -A\sin k(x-a), \qquad a/2 < x < a \tag{6}$$

再将式(6)代入条件(3)得

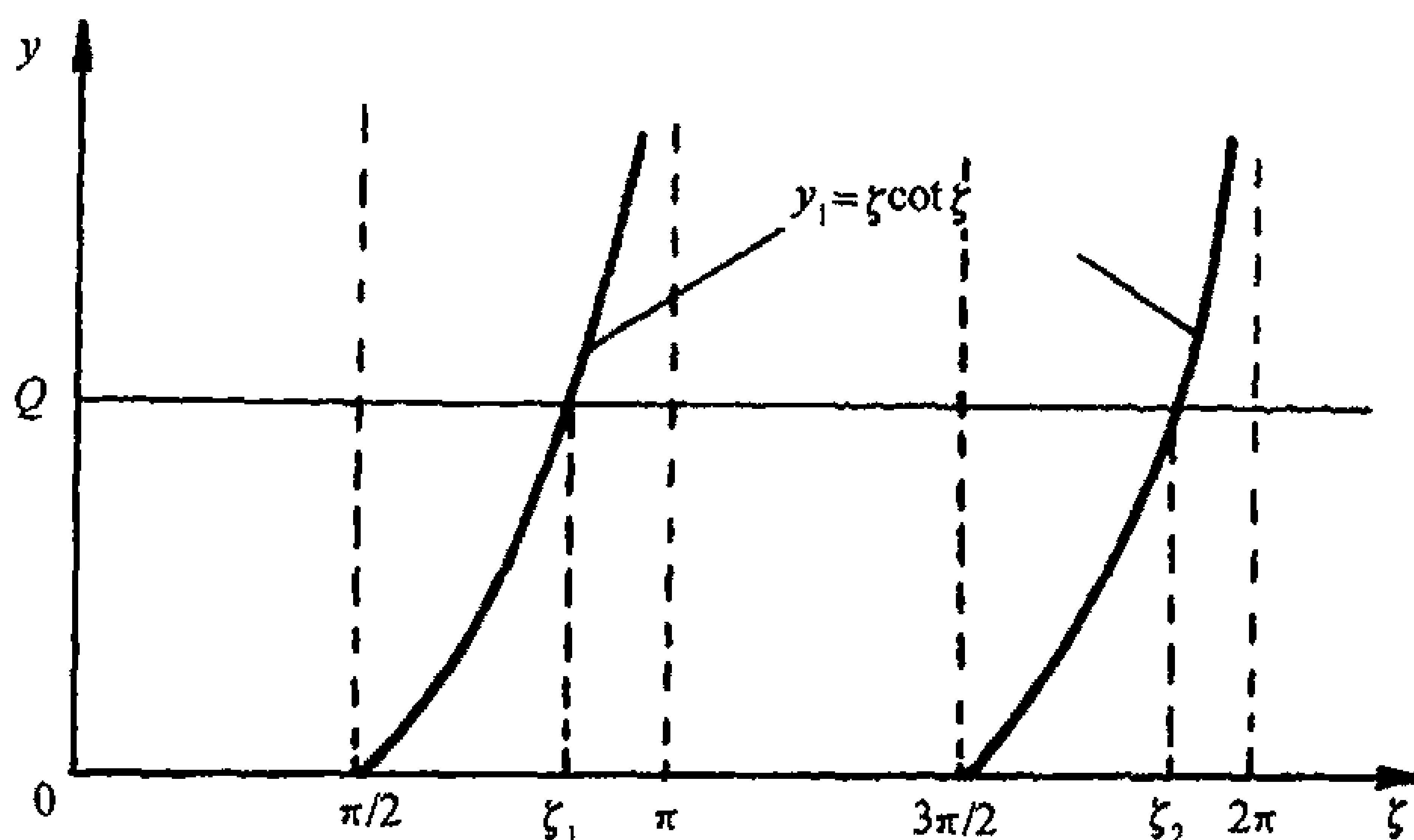
$$-k\cot\frac{ka}{2} = \frac{\mu\alpha}{\hbar^2} \tag{7}$$

令

$$\xi = \frac{ka}{2}, \qquad Q = \frac{\mu\alpha a}{2\hbar^2} \qquad (常数)$$

式(7)变为

$$-\xi\cot\xi = Q$$



题图 2.19

定态能量 E' 由曲线 $y_1 = -\xi\cot\xi$ 和直线 $y_2 = Q$ 的交点 ξ_i $(i = 1, 2, \cdots)$ 决定(题图 2.19)

$$\xi_i = \frac{k_i a}{2} = \sqrt{\frac{2\mu E_i'}{\hbar^2}}\frac{a}{2}$$
$$E_i' = \frac{2\xi_i^2\hbar^2}{\mu a^2}$$

最低能量为 $E_1' = \dfrac{2\xi_1^2\hbar^2}{\mu a^2}$.

因为

$$\frac{\pi}{2} < \xi_1 < \pi$$

故

$$\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2} < E_1' < \frac{2\pi^2\hbar^2}{\mu a^2}$$

前一组中的最低能量为 $E_2 = \dfrac{2\pi^2\hbar^2}{\mu a^2}$. 可见体系的基态能量是 E_1'，第一激发态能量是 E_2.

当 $\alpha \to 0$ 时(此时 $V(x)$ 为宽为 a 的无限深方势阱)，$Q \to 0$. 由上图看出，曲线 $y_1 = -\xi\cot\xi$ 和直线 $y_2 = Q$ 的交点 $\xi_i = \pi/2, 3\pi/2, 5\pi/2, \cdots$ 处，相应的能量为

$$E_i' = \frac{2n_i^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}, \qquad n_i = 1, 3, 5, \cdots$$

这正是无限深方势阱中 $n = 1, 3, 5, \cdots$ 的定态能量 E_n.

2.20 处于谐振子叠加态的 $\langle x \rangle$

题 2.20 考虑一谐振子，令 ψ_0 和 ψ_1 分别为它的基态与第一激发态的波函数(均为实的和归一化的). 令 $A\psi_0 + B\psi_1$ 是某一瞬时振子的波函数，A 和 B 是实数. 证明 x 的平均值一般不为零. A 和 B 取什么值 $\langle x \rangle$ 为最大和最小？

证明 谐振子的本征态 ψ_n，n 为奇(偶)数时，分别为奇(偶)函数

$$\begin{aligned}
\langle x \rangle &= \int (A\psi_0 + B\psi_1)^* x (A\psi_0 + B\psi_1) \mathrm{d}x \\
&= \int (A^* B\psi_0^* x\psi_1 + AB^* \psi_1^* x\psi_0) \mathrm{d}x \\
&= \int 2AB\psi_0 x\psi_1 \mathrm{d}x = 2AB \int \psi_0 x\psi_1 \mathrm{d}x \\
&= \left[1 - (A-B)^2\right] \int \psi_0 x\psi_1 \mathrm{d}x
\end{aligned}$$

一般不为零. 考虑到 $A^2 + B^2 = 1$，$A = B = \frac{1}{\sqrt{2}}$ 时，$\langle x \rangle$ 最大；$A = -B = \frac{1}{\sqrt{2}}$ 时，$\langle x \rangle$ 最小.

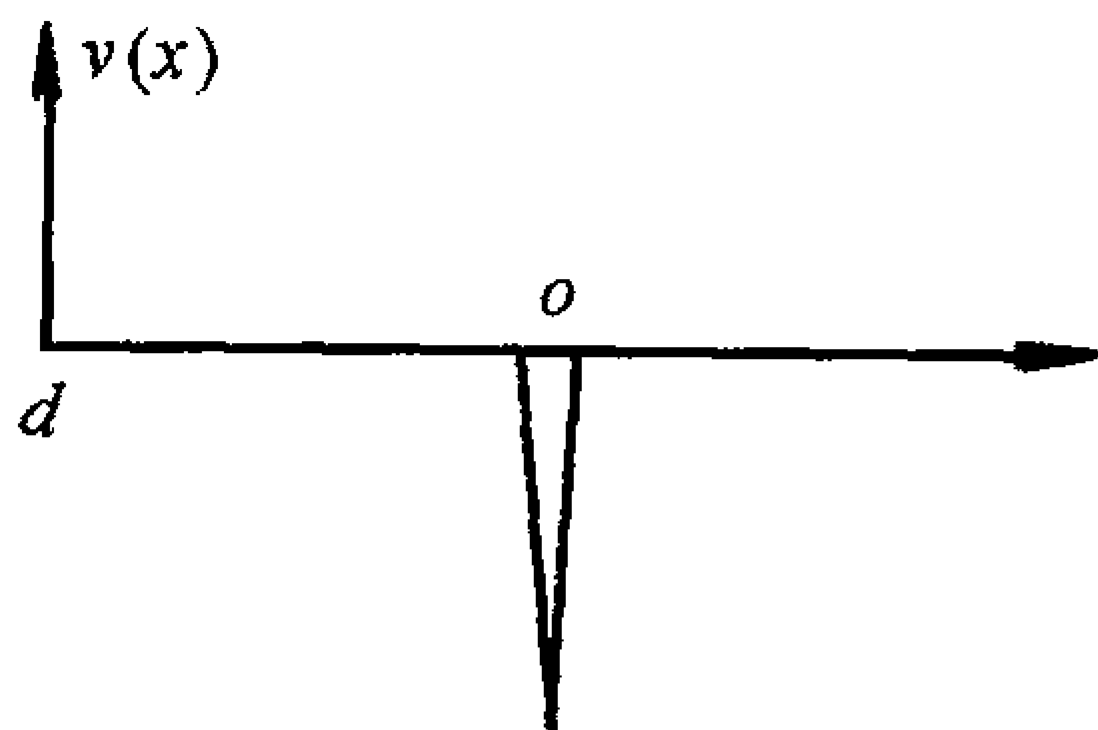
2.21 $V(x) = \begin{cases} -V_0\delta(x), & x > -d \\ \infty, & x < -d \end{cases}$

题 2.21 原子在势壁附近的行为，可以从下面的近似模型出发考虑：

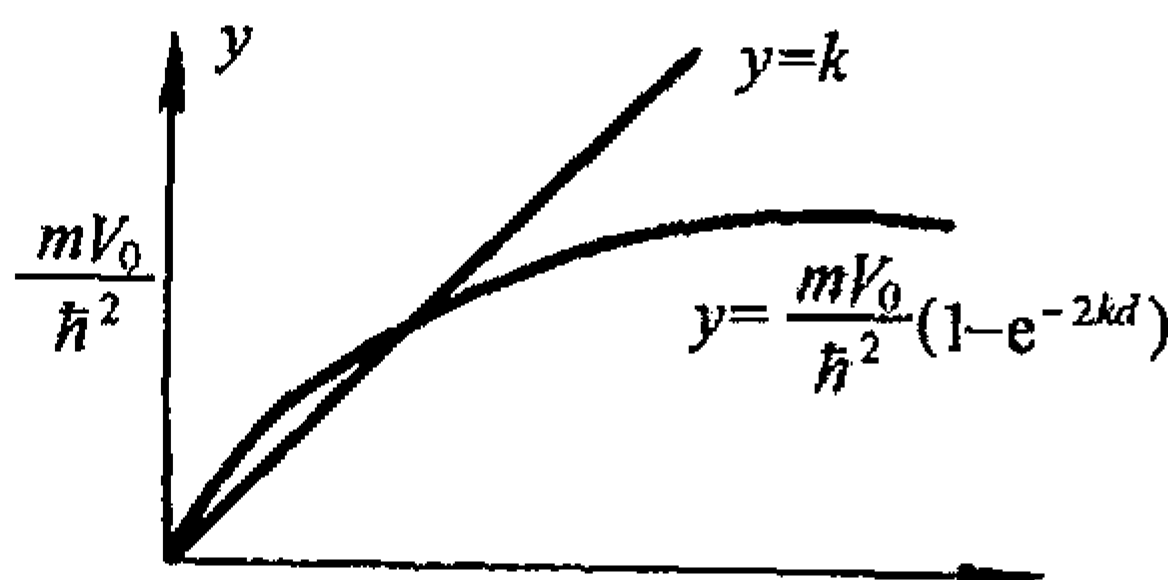
一个粒子在一维势(题图 2.21(a))

$$V(x) = \begin{cases} -V_0\delta(x), & x > -d \\ \infty, & x < -d \end{cases}$$

中运动. (1) 求出当势壁离粒子很远时，对束缚态能量的修正值. 还要说明多远才算是“很远”. (2) 至少存在一个束缚态时，V_0 和 d 应满足什么严格条件？



题图 2.21(a)



题图 2.21(b)

解 (1) Schrödinger 方程为

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E + V_0\delta(x)\right]\psi = 0, \qquad x > -d$$

记 $k=\dfrac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$，解的形式为

$$\psi(x)=\begin{cases}ae^{kx}+be^{-kx}, & -d<x<0\\ e^{-kx}, & x>0\end{cases}$$

波函数连续条件和在 $x=0$ 处的导数跃变条件给出

$$\begin{cases}a+b=1\\ -k-(ak-bk)=-\dfrac{2mV_0}{\hbar^2}\\ ae^{-kd}+be^{kd}=0\end{cases}$$

所以

$$a=-\frac{e^{2kd}}{1-e^{2kd}},\qquad b=\frac{1}{1-e^{2kd}},\qquad k=\frac{mV_0}{\hbar^2}(1-e^{-2kd})$$

壁远离粒子意味着 $kd\gg1$，则上式右边的 k 可以用 $\dfrac{mV_0}{\hbar^2}$ 代替，即有

$$k\approx\frac{mV_0}{\hbar^2}\left[1-\exp\left(-\frac{2mV_0d}{\hbar^2}\right)\right]$$

于是

$$\begin{aligned}E&=-\frac{\hbar^2k^2}{2m}\approx-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{mV_0}{\hbar^2}\right)^2\left[1-\exp\left(\frac{2mV_0d}{\hbar^2}\right)\right]^2\\&\approx-\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}\left[1-2\exp\left(-\frac{2mV_0d}{\hbar^2}\right)\right]\\&=-\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}+\frac{mV_0^2}{\hbar^2}\exp\left(-\frac{2mV_0d}{\hbar^2}\right)\end{aligned}$$

后一项即为能量修正. 从上面可以看出，如果要使能量修正很小，就应有

$$d>\frac{1}{k}=\frac{\hbar^2}{mV_0}$$

这就是“远离”的含义.

(2) 若使 $k=\dfrac{mV_0}{\hbar^2}(1-e^{-2kd})$ 有解，从题图 2.21(b)中可以看出，应有曲线 $y=\dfrac{mV_0}{\hbar^2}(1-e^{-2kd})$ 在原点处的斜率大于 $y=k$ 的斜率，即

$$\left.\frac{dy}{dk}\right|_{k=0}=\frac{2mV_0d}{\hbar^2}>1$$

这时存在一个束缚态解.

2.22　Dirac 梳

题 2.22　质量为 m 的粒子束以动量 $p=\hbar k$ 从 $x=-\infty$ 处入射，受到周期性 δ 势垒

$$V(x)=V_0\sum_{n=0}^{\infty}\delta(x-na),\qquad a>0$$

的作用，求能够出现完全反射的动量值.

解 在x表象中直接计算，以便更加形象地分析在各个δ势垒处波的反射和透射情况. 为了便于讨论，先设δ势垒总数为N，最后再令$N\to\infty$. 各势垒位置为

$$x=0, a, 2a, \cdots, (N-1)a$$

它们把空间分隔为$N+1$个区域，我们把区域$(n-1)a<x<na$作为第n区. $x<0$为第0区，$x>(N-1)a$为第N区. 波函数$\psi(x)$满足能量本征方程

$$\psi''+k^2\psi-\frac{2mV_0}{\hbar^2}\sum_n\delta(x-na)\psi(x)=0 \tag{1}$$

在各个区域中，式(1)的解只能取$e^{\pm ikx}$的形式. 设第n区中波函数为

$$\psi_n(x)=D_n e^{ikx}+R_n e^{-ikx} \tag{2}$$

在$x=na$处，ψ的连续性条件要求

$$\psi_n(na)=\psi_{n+1}(na), \qquad n=0,1,2,\cdots,(N-1) \tag{3}$$

在$x=na$处，ψ'的跃变性条件要求

$$\psi'_{n+1}(na)-\psi'_n(na)=\frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi_n(na) \tag{4}$$

在波函数取式(2)的情况下，式(3)、式(4)给出

$$R_{n+1}-R_n=(D_n-D_{n+1})e^{2inak} \tag{5}$$

$$R_{n+1}-R_n=\mathrm{i}\alpha(R_n+D_n e^{2niak}) \tag{6}$$

其中

$$\alpha=\frac{mV_0}{k\hbar^2}$$

各系数D_n、R_n原则上可以由式(5)、式(6)解出. 但如果$\hbar k$是任意给定的，结果较复杂，这里不讨论. 下面只讨论下式成立时有何结论

$$e^{2inak}=1, \qquad n=0,1,2,\cdots$$

这时式(5)给出

$$D_0-D_1=R_1-R_0$$

$$D_1-D_2=R_2-R_1$$

$$\vdots$$

$$D_n-D_{n+1}=R_{n+1}-R_n$$

$$D_{N-1}-D_N=-R_{N-1} \tag{7}$$

(最后一个区域中只有透射波，$R_N=0$)以上各式相加，即得

$$D_0+R_0=D_N \tag{8}$$

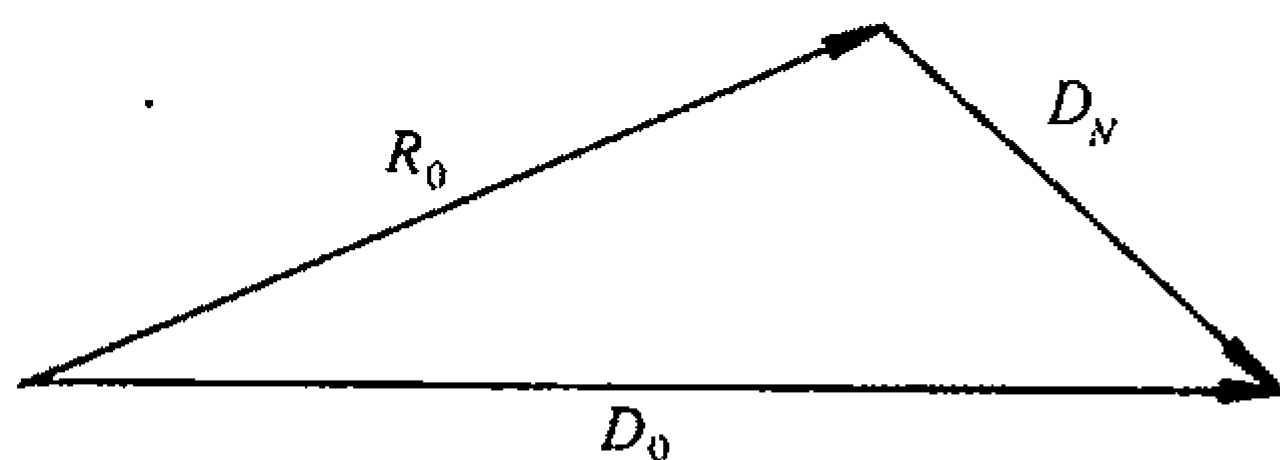
其中D_0为入射波振幅，R_0为反射波振幅，D_N为最后的透射波振幅，因此

$$\text{反射概率}=\left|\frac{R_0}{D_0}\right|^2, \qquad \text{透射概率}=\left|\frac{D_N}{D_0}\right|^2$$

概率守恒要求

$$|D_0|^2=|R_0|^2+|D_N|^2 \tag{9}$$

式(8)、式(9)表明，D_0，R_0，D_N 作为复数，如题图 2.22 所示，应该在复平面上构成直角三角形的三条边.



题图 2.22

式(7)给出

$$R_n + D_n = R_{n+1} + D_{n+1} = \cdots = D_n$$

式(6)给出

$$R_0 - R_n = ia(R_n + D_n) = iaD_N, \qquad n = 0,1,2,\cdots$$

即

$$R_1 - R_0 = R_2 - R_1 = \cdots = -R_{N-1} = iaD_N$$

容易解出

$$-R_0 = iNaD_N, \qquad -R_1 = i(N-1)aD_N, \cdots \tag{10}$$

给定入射波 $D_0 e^{ikx}$ 后，由于 $|R_0| \leqslant |D_0|$，当 δ 势垒总数 N 趋于 ∞ 时，必有 $D_N \to 0$，则式(8)给出

$$R_0 \to D_0, \qquad N \to 0$$

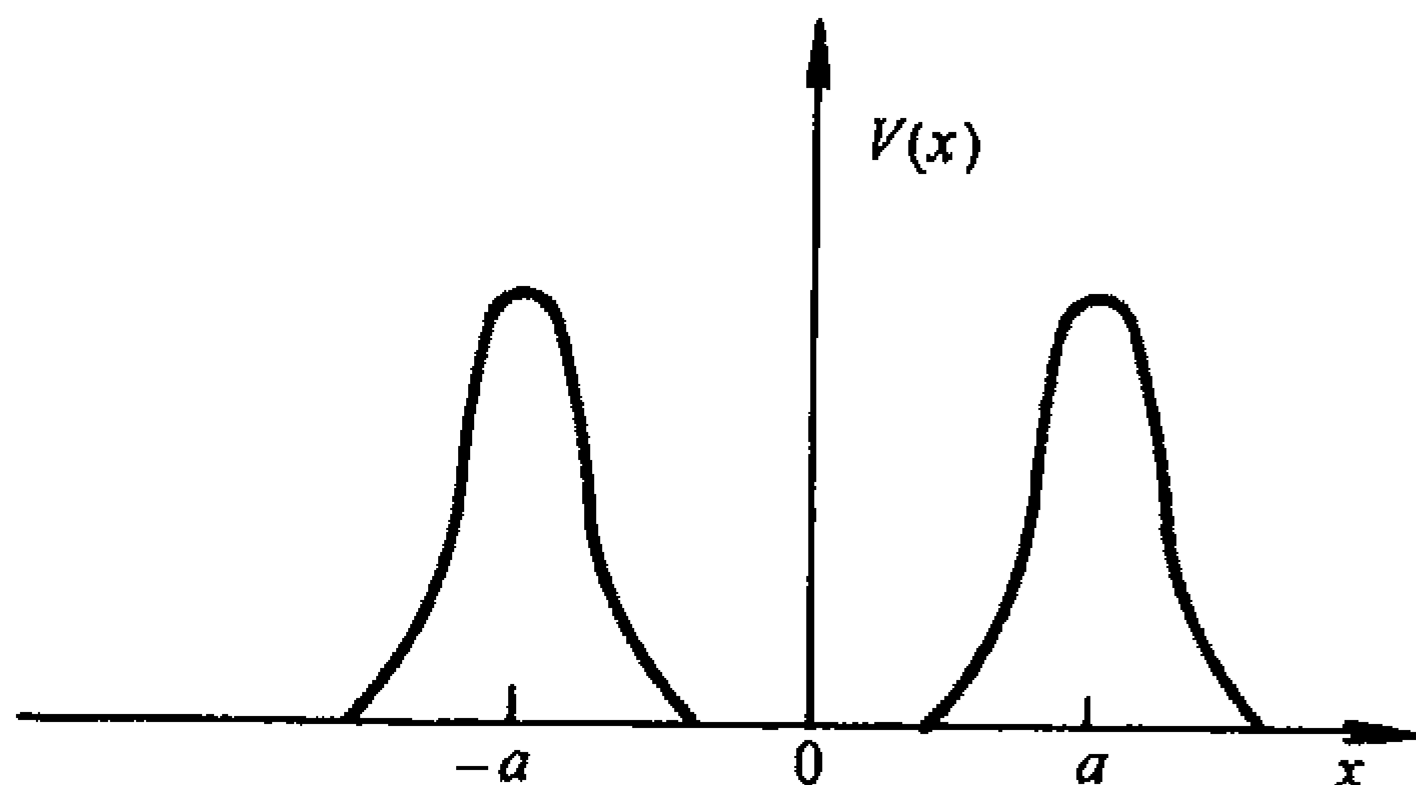
亦即透射波概率为 0，反射波概率为 1. 由式(10)还可以看出，各 R_n $(n = 0,1,2,\cdots)$ 式是同相的，其数值则按照等差数列逐级递减. 各 D_N 也按同样的规律变化.

2.23　双 δ 势垒中的共振态能级

题 2.23　如题图 2.23 所示粒子在双 δ 势垒

$$V(x) = V_0\left[\delta(x+a) + \delta(x-a)\right]$$

作用下运动，求共振态能级.



题图 2.23

解　能量本征方程为

$$\psi'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi - \frac{2mV_0}{\hbar^2}\left[\delta(x+a) + \delta(x-a)\right]\psi = 0 \tag{1}$$

由于 $V(x) \geqslant 0$，所以 $E > 0$. 令

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{2}$$

在 $x \neq \pm a$ 处，式(1)可以写成

$$\psi'' + k^2\psi = 0 \tag{3}$$

解为 $\psi = \cos kx$ 、$\sin kx$ ，在 $x \to \pm\infty$ 处 ψ 并不趋于 0 ，而呈周期性变化. 因此，本题没有严格的束缚态解和分立能级. 所谓共振态是指 ψ 在垒间区域 $(|x| < a)$ 的值远大于垒外区域 $(|x| > a)$ 的值. 与此相应的能量就成为共振态能级.

在 $x = a$ 处 ψ 应该连续，ψ' 的跃迁条件为

$$\psi'(a+0) - \psi'(a-0) = \frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi(a) \tag{4}$$

在 $x = -a$ 处也有类似的公式.

(1) 偶宇称态

$$\psi(-x) = \psi(x)$$

我们只写出 $x > -a$ 区域的 ψ ，$x < -a$ 区域的 ψ 可按偶函数的条件写出. 由式(3)有

$$\psi(x) = \begin{cases} \cos kx, & -a < x < a \\ A\cos kx + B\sin kx = C\sin(kx+\theta), & x > a \end{cases}$$

由 $x = a$ 处 ψ 的连续性条件，应该有如下关系

$$\cos ka = C\cos(ka+\theta) \tag{5}$$

由 ψ' 的跃变条件式(4)，应该有如下关系

$$C\cos(ka+\theta) + \sin k\theta = \frac{2mV_0}{k\hbar^2}\cos ka \tag{6}$$

作为共振态，要求 $C \sim 0$ ，由式(5)可得

$$|\cos ka| \ll 1$$

因此可令

$$ka = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi - \varepsilon, \qquad n = 0,1,2,\cdots, \quad |\varepsilon| \ll \frac{\pi}{2} \tag{7}$$

代入式(6)，并略去其中较小的 C 项，即得

$$\frac{k\hbar^2}{2mV_0} \approx \cot ka = \cot\left(n\pi + \frac{\pi}{2} - \varepsilon\right) = \tan\varepsilon \approx \varepsilon$$

即

$$\varepsilon \approx \frac{k}{U_0} \approx \frac{(n+1/2)\pi}{aU_0}$$

其中

$$U_0 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$$

代入式(7)，即得

$$k \approx \left(n + \frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{a}\left(1 - \frac{1}{aU_0}\right)$$

再代入式(2)，即得共振能级公式

$$E \approx \frac{\pi^2 (n+1/2)^2 \hbar^2}{2ma^2}\left(1-\frac{2}{aU_0}\right), \qquad n=0,1,2,\cdots \tag{8}$$

(2) 奇宇称态

$$\psi(-x) = -\psi(x)$$

在区域 $x>-a$，波函数为

$$\psi(x)=\begin{cases}\sin kx, & -a<x<a \\ D\sin(kx+\varphi), & x>a\end{cases}$$

类似的可以求出

$$k \approx \frac{n\pi}{a}\left(1-\frac{1}{aU_0}\right), \qquad n=1,2,3,\cdots$$

$$E = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\left(1-\frac{2}{aU_0}\right) \tag{9}$$

式(8)和式(9)可以统一写为

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2}\left(1-\frac{2}{aU_0}\right), \qquad n=1,2,3,\cdots \tag{10}$$

偶宇称态 n 取奇数，奇宇称态 n 取偶数.

共振态出现的必要条件为

$$\varepsilon \approx \frac{k}{U_0} \ll \frac{\pi}{2}$$

亦即

$$U_0 a = \frac{2mV_0 a}{\hbar^2} \gg n, \qquad n=1,2,3,\cdots$$

在这条件下，对于能量 E_n 来说，δ 势垒可以近似地认为是“不透明”的，双 δ 势垒的作用近似于宽度为 $2a$ 的无限深势阱. 式(10)中当 $aU_0 \to \infty$，即得

$$E_n = \frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{2a}\right)^2, \quad n=1,2,3,\cdots$$

这正是无限深势阱的能级公式.

2.24 δ势阱中粒子波函数系数矩阵

题 2.24 质量为 μ 的粒子在势场 $V(x)=-\alpha\delta(x)$, $a>0$ 中运动，设粒子能量 $E<0$，它的波函数为

$$\psi_1(x) = A_1 e^{\lambda x} + A_1' e^{-\lambda x}, \qquad x<0$$

$$\psi_2(x) = A_2 e^{\lambda x} + A_2' e^{-\lambda x}, \qquad x>0$$

(1) 计算矩阵 M

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ A_2' \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_1 \\ A_1' \end{pmatrix}$$

(2) 求能量 E 的值并解出波函数. (3) 动量的概率分布.

解　(1) 对束缚态来说，由束缚态边条件 $\psi \xrightarrow{x\to\pm\infty} 0$ 有

$$\begin{cases}\psi_1(x)=A_1\mathrm{e}^{\lambda x}, & x<0\\ \psi_2(x)=A_2\mathrm{e}^{-\lambda x}, & x>0\end{cases}$$

即

$$A_1'=A_2'=0$$

由于 $V(x)$ 具有空间反演对称性，能量本征态具有确定宇称，故可判定奇宇称束缚态不存在，只存在偶宇称态 $A_1=A_2'$，故 $M=\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix}$，即

$$\begin{pmatrix}A_2\\A_2'\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}A_1\\A_1'\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\A_1\end{pmatrix}$$

(2) 对束缚态，由前面讨论只存在偶宇称解

$$\begin{cases}\psi_1(x)=A\mathrm{e}^{\lambda x}, & x<0\\ \psi_2(x)=A\mathrm{e}^{-\lambda x}, & x>0\end{cases}$$

利用 $x=0$ 处 ψ' 的跃变条件

$$\psi'(0^+)-\psi'(0^-)=-\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}\psi(0)$$

解出　$E=-\dfrac{\mu\alpha^2}{2\hbar^2}$，只存在一个偶宇称束缚态(基态).

归一化的波函数为

$$\psi(x)=\sqrt{\lambda}\mathrm{e}^{-\lambda|x|},\qquad \lambda=\frac{\mu\alpha}{\hbar^2}$$

(3) $\psi(x)$ 在动量表象中形式为 $\varphi(p)$

$$\varphi(p)=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{d}x$$

$$=\left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{\mu\alpha}{\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{1}{p^2+\left(\frac{\mu\alpha}{\hbar}\right)^2}$$

$$=\left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}(\hbar\lambda)^{\frac{3}{2}}\frac{1}{p^2+(\hbar\lambda)^2}$$

故

$$|\varphi(p)|^2=\frac{2(\hbar\lambda)^3}{\pi}\cdot\frac{1}{(p^2+\hbar^2\lambda^2)^2}$$

2.25　在动量表象中求解δ势阱束缚态问题

题 2.25　在动量表象中求解δ势阱

$$V(x)=-V_0\delta(x)$$

的束缚态能级和本征函数.

解　动量表象中能量的本征方程为

$$\frac{p^2}{2m}\varphi(p)+\int_{-\infty}^{\infty}V_{pp'}\phi(p')\mathrm{d}p'=E\phi(p) \tag{1}$$

其中

$$V_{pp'}=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}V(x)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p'-p)x}\mathrm{d}x=-\frac{V_0}{2\pi\hbar}$$

代入式(1)，有

$$\left(\frac{p^2}{2m}-E\right)\varphi(p)=\frac{V_0}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(p')\mathrm{d}p'=C \tag{2}$$

所以

$$\phi(p)=\frac{A}{p^2-2mE} \tag{3}$$

将式(3)代入式(2)右端，得到

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}p}{p^2-2mE}=\frac{\pi\hbar}{mV_0} \tag{4}$$

此即能级方程. 束缚态 $E<0$，令

$$k=\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$$

由于

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}p}{p^2-2mE}=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}p}{p^2+\hbar^2k^2}=\frac{\pi}{\hbar k}$$

代入式(4)，有

$$k=\frac{mV_0}{\hbar^2}$$

因此

$$E=-\frac{\hbar^2k^2}{2m}=-\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}$$

归一化能量本征态

$$\phi(p)=\left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}(\hbar k)^{\frac{3}{2}}\frac{1}{p^2+\hbar^2k^2}$$

2.26　粒子在非经典区的概率(谐振子基态)

题 2.26　力常数为 k、质量为 m 的谐振子基态波函数为

$$\psi_0(x)=\left(\frac{a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}ax^2},\qquad a=\frac{m\omega_0}{\hbar},\qquad \omega_0^2=\frac{k}{m}$$

求在经典区域之外找到粒子的概率的表达式.

解 非经典区域是 $E<V(x)$ 的区域. 基态下

$$E=\frac{1}{2}\hbar\omega_0$$

因此非经典区域为

$$\frac{1}{2}\hbar\omega_0<\frac{1}{2}m\omega_0^2x^2$$

$$x^2>\frac{\hbar}{\omega_0 m}=\frac{1}{a},\qquad \begin{cases}x>\sqrt{\dfrac{1}{a}}\\ x<-\sqrt{\dfrac{1}{a}}\end{cases}$$

在非经典区域里找到粒子的概率为

$$P=\int_{-\infty}^{-\sqrt{1/a}}\sqrt{\frac{a}{\pi}}\mathrm{e}^{-ax^2}\mathrm{d}x+\int_{\sqrt{1/a}}^{\infty}\sqrt{\frac{a}{\pi}}\mathrm{e}^{-ax^2}\mathrm{d}x=2\int_{\sqrt{1/a}}^{\infty}\sqrt{\frac{a}{\pi}}\mathrm{e}^{-ax^2}\mathrm{d}x=2\int_{1}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{\pi}}\mathrm{e}^{-t^2}\mathrm{d}t\approx16\%$$

2.27 粒子在对称方势阱中运动，阱口刚好出现一条束缚态能级的条件

题 2.27 粒子在深度为 V_0，宽度为 a 的对称方势阱中运动，求：(1) 在阱口附近刚好出现一条束缚能级($E\approx V_0$)的条件；(2) 束缚态能级总数.

解 写出 1，2，3 区内的 Schrödinger 方程

$$\begin{cases}-\dfrac{\hbar^2}{2m}\cdot\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}^2x}\psi_1+V_0\psi_1=E\psi_1,\ x<-\dfrac{a}{2},\psi_1=A\mathrm{e}^{k_1x},\ k_1^2=\dfrac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}\\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\cdot\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}^2x}\psi_2=E\psi_2,\ |x|\leqslant\dfrac{a}{2},\ \psi_2=B\sin k_2x+C\cos k_2x,\ k_2^2=\dfrac{2mE}{\hbar^2}\\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\cdot\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}^2x}\psi_3+V_0\psi_3=E\psi_3,\ x>\dfrac{a}{2},\ \psi_3=D\mathrm{e}^{-k_1x},\ k_1^2=\dfrac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}\end{cases}$$

(1) $E\approx V_0(E<V_0)$, $k_1\to0$. 将 ψ_2 分为奇、偶宇称态

$$\begin{cases}\psi_2=B\sin k_2x, & \text{奇宇称态}\\ \psi_2=C\cos k_2x, & \text{偶宇称态}\end{cases}$$

并利用 ψ，ψ' 连续，$\psi_1'(a/2)=\psi_2'(a/2)\propto k_1\to0$.

对于奇、偶宇称态分别有

$$\begin{cases}\psi_2'=Bk_2\cos\dfrac{k_2a}{2}=0, & k_2=\dfrac{n\pi}{a}, & n=1,3,\cdots\\ \psi_2'=Ck_2\sin\dfrac{k_2a}{2}=0, & k_2=\dfrac{n\pi}{a}, & n=2,4,\cdots\end{cases}$$

因为$k_2^2=\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$，阱口刚好出现一条能级的条件是

$$\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2\approx\frac{2mV_0}{\hbar^2}$$

即

$$V_0\approx\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2$$

(2) 若$\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}<\pi^2$，阱中存在一个束缚态，为偶宇称态；

若$\pi^2\leqslant\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}<(2\pi)^2$，阱中出现另一条束缚能级，为奇宇称态；

若$(2\pi)^2\leqslant\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}<(3\pi)^2$，阱中出现第三条束缚能级；

⋮

若$(n\pi)^2\leqslant\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}<[(n+1)\pi]^2$，出现第$n+1$条能级.

所以,束缚能级总数$N=1+\left[\frac{a}{\pi\hbar}\sqrt{2mV_0}\right]$,这里的$\left[\frac{a}{\pi\hbar}\sqrt{2mV_0}\right]$表示不超过$\frac{a}{\pi\hbar}\sqrt{2mV_0}$的最大整数.

2.28　van der Waals 力势场中的束缚态

题 2.28　分子间的 van der Waals 力所产生的势能可近似的表示为

$$V(x)=\begin{cases}\infty, & x<0\\ V_0, & 0\leqslant x\leqslant a\\ -V_1, & a\leqslant x\leqslant b\\ 0, & x>b\end{cases}$$

求束缚态的能级所满足的方程.

解　van der Waals 力即分子间的内聚力. 用它可解释表面张力、吸附作用和其他分子现象. 此例表现在实际的气体的 van der Waals 气体方程中. 束缚态下粒子能量的取值范围为$-V_1<E<0$.

当$x<0$时，由于$V(x)\to\infty$，所以$\psi_1(x)=0$.

当$0\leqslant x\leqslant a$时，$V(x)=V_0$，相应的定态 Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_2(x)+V_0\psi_2(x)=E\psi_2(x)$$

令$k_1^2=\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)>0$，其解为

$$\psi_2(x)=A_1\mathrm{e}^{k_1x}+B_1\mathrm{e}^{-k_1x}$$

当$a\leqslant x\leqslant b$时，$V(x)=-V_1$，相应的定态 Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_3(x)-V_1\psi_3(x)=E\psi_3(x)$$

令$k_2^2=\frac{2m}{\hbar^2}(|V_1|+E)>0$，其解为

$$\psi_3(x)=A_2\sin k_2x+B_2\cos k_2x$$

当$x>b$时，$V(x)=0$，相应的定态 Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_4(x)=E\psi_4(x)$$

令$-k_3^2=\frac{2mE}{\hbar^2}>0$，其解为

$$\psi_4(x)=A_3\mathrm{e}^{k_3x}+B_3\mathrm{e}^{-k_3x}$$

根据波函数的有限性，要求$\psi(x)\xrightarrow{|x|\to\infty}0$，故$A_3=0$，于是

$$\psi_4(x)=B_3\mathrm{e}^{-k_3x}$$

再让波函数满足连续性要求，有

$\psi_1\big|_{x=0}=\psi_2\big|_{x=0}$，故 $A_1+B_1=0$

$\psi_3\big|_{x=a}=\psi_2\big|_{x=a}$，故 $A_2\sin k_2a+B_2\cos k_2a=A_1\mathrm{e}^{k_1a}+B_1\mathrm{e}^{-k_1a}$

$\psi_3'\big|_{x=a}=\psi_2'\big|_{x=a}$，故 $A_2k_2\sin k_2a-B_2k_2\sin k_2a=A_1k_1\mathrm{e}^{k_1a}-B_1k_1\mathrm{e}^{-k_1a}$

$\psi_4\big|_{x=b}=\psi_3\big|_{x=b}$，故 $B_3\mathrm{e}^{-k_3b}=A_2\sin k_2b+B_2\cos k_2b$

$\psi_4'\big|_{x=b}=\psi_3'\big|_{x=b}$，故 $-B_3k_3\mathrm{e}^{-k_3b}=A_2k_2\cos k_2b-B_2k_2\sin k_2b$

要使$\psi(x)$有非零解，系数A_1,B_1,A_2,B_2,B_3不能同时为零. 则其系数组成的行列式必须为零，有

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sin k_2b & \cos k_2b & -\mathrm{e}^{-k_3b} \\ 0 & 0 & k_2\cos k_2b & -k_2\sin k_2b & k_3\mathrm{e}^{-k_3b} \\ \mathrm{e}^{k_1a} & \mathrm{e}^{-k_1a} & -\sin k_1a & -\cos k_2b & 0 \\ k_1\mathrm{e}^{k_1a} & -k_1\mathrm{e}^{-k_1a} & -k_2\cos k_2a & k_2\sin k_2a & 0 \end{vmatrix}=0$$

计算此行列式，得到超越方程

$$\tan k_2(b-a)=\frac{k_1\cosh k_1a+k_3\sinh k_1a}{k_2^2\sinh k_1a-k_1k_3\cosh k_1a} \tag{1}$$

因为k_1,k_2,k_3都含有能量E，故式(1)就是束缚态能级满足的方程.

2.29 限制在圆周上运动且存在一个δ势垒的束缚态

题 2.29 一个质量为μ的粒子在一圆周(周长为L)上运动. 如果还存在δ函数势$V(x)=a\delta\left(x-\frac{L}{2}\right)$，$a\neq0$. 请求出系统所有能级和相应的归一化波函数.

解　定态方程为

$$\left[\frac{L_z^2}{2I}+V(\varphi)\right]\psi(\varphi)=E\psi(\varphi) \tag{1}$$

式中 $I=\mu R^2$，R 为圆的半径. $V(\varphi)$ 由 $V(x)=a\delta\left(x-\frac{L}{2}\right)$ 令 $x=R\varphi$ 与 $L=2\pi R$ 得到

$$V(\varphi)=a\delta\big(R(\varphi-\pi)\big)=\frac{a}{R}\delta(\varphi-\pi) \tag{2}$$

将式(2)及 $L_z=-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}$ 代入方程(1)中，得

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2I}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi^2}+\frac{a}{R}\delta(\varphi-\pi)\right]\psi(\varphi)=E\psi(\varphi)$$

这个方程的解为

$$\psi_1(\varphi)=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\varphi},\qquad 0\leqslant\varphi<\pi$$

$$\psi_2(\varphi)=C\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}+D\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\varphi},\qquad \pi<\varphi\leqslant 2\pi$$

其中 $m=0,1,2,\cdots$. 由 $\psi(\varphi)$ 在 $\varphi=\pi$ 的连续性条件：$\psi_1(\pi)=\psi_2(\pi)$，$\psi_1'(0)$ 在 $\varphi=0$ 或 2π 处的连续性条件：$\psi_1'(0)=\psi_2'(0)$，及 $\psi'(\varphi)$ 在 $\varphi=\pi$ 处的不连续性条件

$$\psi_2'(\pi)-\psi_1'(\pi)=\frac{2Ia}{\hbar^2R}\psi_1(\pi)$$

得到系数 $ABCD$ 满足的如下 3 个方程

$$A+B=C+D$$

$$A-B=C-D$$

$$C-A-D+B=-\frac{\mathrm{i}2Ia}{m\hbar^2R}(A+B)$$

由这三个方程解得

$$B=-A,\qquad C=A,\qquad D=-A$$

$$\psi_1(\varphi)=A\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\varphi}\right),\qquad 0\leqslant\varphi<\pi$$

$$\psi_2(\varphi)=A\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\varphi}\right),\qquad \pi<\varphi\leqslant 2\pi$$

即

$$\psi(\varphi)=A'\sin m\varphi,\qquad 0\leqslant\varphi\leqslant 2\pi$$

粒子的归一化定态波函数与相应的定态能量为

$$\psi(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin m\varphi,\qquad 0\leqslant\varphi\leqslant 2\pi$$

$$E=\frac{\hbar^2m^2}{2I},\qquad m=1,2,\cdots$$

由于 $m=0$，$\psi(\varphi)=0$，故不含 $m=0$.

2.30　限制在一段圆弧上运动的粒子

题 2.30　质量为 μ 的粒子被约束在半径 r 的圆周上运动. (1) 设立路障，进一步限制粒

子在$0<\varphi<\varphi_0$的一段圆弧上运动

$$V(\varphi)=\begin{cases}0, & 0\leqslant\varphi<\varphi_0\\ \infty, & \varphi_0\leqslant\varphi<2\pi\end{cases}$$

求解粒子能量本征值和本征函数；(2) 设粒子处于情况(1)的基态，求突然撤去路障后，粒子仍然处于最低能量态的概率.

解　(1) 在路障外，波函数$\psi(\varphi)=0$．在路障内，定态方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2I}\cdot\frac{\mathrm{d}^2\psi(\varphi)}{\mathrm{d}\varphi^2}=E\psi(\varphi) \tag{1}$$

其中$I=\mu r^2$．方程(1)的解为

$$\psi(\varphi)=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\varphi}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\varphi},\qquad 0<\varphi<\varphi_0 \tag{2}$$

其中$k=\sqrt{\frac{2IE}{\hbar^2}}$．由$\psi(0)=0$，得$B=-A$，代入式(2)得

$$\psi(\varphi)=A\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\varphi}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\varphi}\right)=c\sin k\varphi,\qquad 0<\varphi<\varphi_0$$

由$\psi(\varphi_0)=0$，得

$$k=\frac{n\pi}{\varphi_0},\qquad E=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2I\varphi_0^2},\qquad n=1,2,\cdots$$

由归一化条件

$$\int_0^{\varphi_0}|\psi(\varphi)|^2\,\mathrm{d}\varphi=1$$

算出归一化常数$c=\sqrt{\frac{2}{\varphi_0}}$

$$\psi(\varphi)=\begin{cases}\sqrt{\frac{2}{\varphi_0}}\sin\frac{n\pi\varphi}{\varphi_0}, & 0\leqslant\varphi<\varphi_0\\ 0, & \varphi_0\leqslant\varphi<2\pi\end{cases}$$

(2) 设$t=0$时撤去路障，撤去路障后的定态波函数与定态能量为

$$\psi_m(\varphi)=\frac{1}{2\pi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi},\qquad E_m=\frac{m^2\hbar^2}{2I},\qquad m=0,\pm1,\pm2,\cdots$$

任意t时刻的波函数为

$$\psi(\varphi,t)=\sum_m c_m\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_m t/\hbar}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}}{\sqrt{2\pi}}$$

$$\psi(\varphi,0)=\sum_m\frac{c_m\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}}{\sqrt{2\pi}}=\begin{cases}\sqrt{\frac{2}{\varphi_0}}\sin\frac{\pi\varphi}{\varphi_0}, & 0\leqslant\varphi<\varphi_0\\ 0, & \varphi_0\leqslant\varphi<2\pi\end{cases}$$

其中系数

$$c_m=\frac{1}{\sqrt{\pi\varphi_0}}\int_0^{\varphi_0}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\varphi}\sin\frac{\pi\varphi}{\varphi_0}\mathrm{d}\varphi$$

$$c_0=\frac{1}{\sqrt{\pi\varphi_0}}\int_0^{\varphi_0}\sin\frac{\pi\varphi}{\varphi_0}\mathrm{d}\varphi=\frac{2\varphi_0}{\pi\sqrt{\pi\varphi_0}}$$

粒子仍处于基态的概率为$|c_0|^2=\dfrac{4\varphi_0}{\pi^3}$.

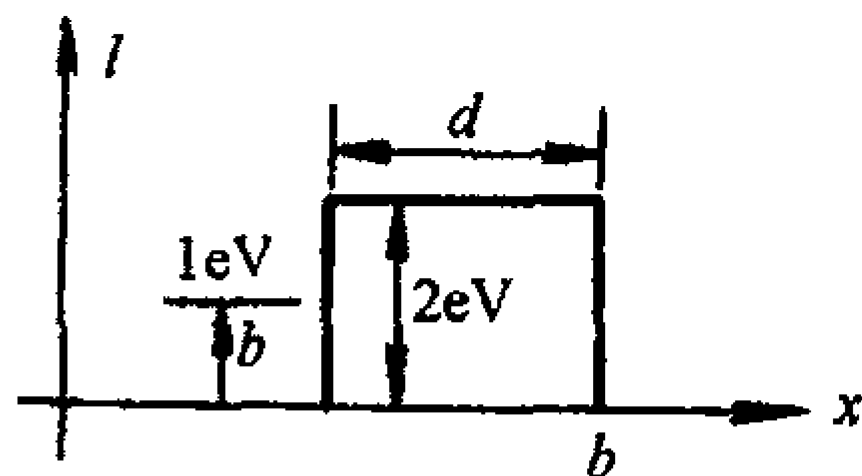
2.31　计算散射势垒的宽度

题 2.31　能量为 1eV 的电子入射到矩形势垒上,势垒高为 2eV 为使穿透概率约为10^{-3}，势垒大约多宽?

解　如题图 2.31 所示

$$T\approx\frac{16E(V_0-E)}{V_0^2}\cdot\exp\left[-\frac{2d}{\hbar}\sqrt{2m(V_0-E)}\right]$$

$$=4\exp\left[-\frac{2d}{\hbar}\sqrt{2m(V_0-E)}\right]\approx10^{-3}$$



题图 2.31

所以

$$d=\frac{1}{2}\hbar\cdot\frac{1}{\sqrt{2m(V_0-E)}}\cdot\frac{3.602}{\lg e}\approx8.1\ \text{Å}$$

2.32　谐振子基态为最小不确定性态

题 2.32　证明若$\Delta x\Delta p=\dfrac{\hbar}{2}$，其中$(\Delta p)^2=\left\langle\left[p-\langle p\rangle\right]^2\right\rangle$，则简谐振子最小能量为$\dfrac{\hbar\omega}{2}$.

解　对谐振子有

$$\langle x\rangle=\langle p\rangle=0$$

因此

$$(\Delta x)^2=\langle x^2\rangle,\qquad(\Delta p)^2=\langle p^2\rangle$$

谐振子 Hamilton 量为

$$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}x^2$$

$$\langle H\rangle=\frac{\langle p^2\rangle}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}\langle x^2\rangle=\frac{\langle\Delta p\rangle^2}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}\langle\Delta x\rangle^2$$

利用$\sqrt{ab}\leqslant\dfrac{a+b}{2}$(其中$a$、$b$为实数)，得

$$\langle H\rangle_{\min}=\sqrt{\langle\Delta p\rangle^2\langle\Delta x\rangle^2}\,\omega=\frac{\hbar\omega}{2}$$

2.33　谐振子能量本征态的演化

题 2.33　一电子禁闭在一维谐振子基态，使得

$$\sqrt{\left\langle\left[x-\langle x\rangle\right]^2\right\rangle}=10^{-10}\text{m}$$

求激发该电子到其第一激发态所需的能量(用 eV 表示)(**提示**　利用 Virial 定理).

解　对一维谐振子 Virial 定理为

$$\langle T\rangle=\langle V\rangle$$

因此

$$E_0=\langle H\rangle=\langle T\rangle+\langle V\rangle=2\langle V\rangle=m_e\omega^2\langle x^2\rangle$$

即

$$\frac{1}{2}\hbar\omega=m_e\omega^2\langle x^2\rangle$$

谐振子的$\langle x\rangle=0$，故

$$\sqrt{\langle[x-\langle x\rangle]^2\rangle}=\sqrt{\langle x^2\rangle}=10^{-10}\mathrm{m}$$

因此

$$\omega=\frac{\hbar}{2m_e\langle x^2\rangle}$$

到第一激发态所需能量为

$$E=\hbar\omega$$

将ω的表达式代入，得

$$E=\frac{\hbar^2}{2m_e\langle x^2\rangle}\approx 3.8(\mathrm{eV})$$

2.34 谐振子随时间的演化(1)

题 2.34 在$t=0$时，处在谐振子势$V=\frac{1}{2}kx^2$中一粒子波函数为

$$\psi(x,0)=A\mathrm{e}^{-(ax)^2/2}\left[\cos\beta H_0(ax)+\frac{\sin\beta}{2\sqrt{2}}H_2(ax)\right]$$

其中β和A为实常数，$a^2=\frac{1}{\hbar}\sqrt{mk}$，且 Hermite 多项式是归一的

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-ax^2}[H_0(ax)]^2\,\mathrm{d}x=\frac{\sqrt{n}}{a}2^n n!$$

(1) 写出$\psi(x,t)$的表达式. (2) 在该态中测得粒子能量的可能结果是什么？且得到这些值的相对概率为多大？(3) 在$t=0$时$\langle x\rangle$为多少？$\langle x\rangle$是怎样随时间变化的？

解 (1) 系统的 Schrödinger 方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=H\psi(x,t)$$

$\psi(x,t)$在$t=0$时取给定值$\psi(x,t)$，因H不显含t，则

$$\psi_n(x,t)=\psi_n(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt/\hbar}$$

而

$$H\psi_n(x)=E_n\psi_n(x)$$

用能量本征函数展开$\psi(x,0)$

$$\psi(x,0)=\sum_n a_n\psi_n(x)$$

其中

$$a_n = \int \psi_n^*(x)\psi(x,0)\mathrm{d}x$$

因此

$$\psi(x,t) = \sum_n a_n \psi_n(x) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar}$$

对谐振子

$$\psi_n(x) = N_n \mathrm{e}^{-a^2x^2/2} H_n(ax)$$

$$a_n = \int \mathrm{d}x N_n \mathrm{e}^{-a^2x^2/2} H_n(ax) \mathrm{e}^{-a^2x^2/2} \cdot A\left[\cos\beta H_2(ax) + \frac{\sin\beta}{2\sqrt{2}} H_2(ax)\right]$$

$$= A\left[N_0\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^2}}\cos\beta\delta_{n0} + N_2\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^2}}2\sqrt{2}\sin\beta\delta_{n2}\right]$$

所以

$$\psi(x,t) = A\left(\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}\right)^{\frac{1}{2}}(\cos\beta\psi_0(x)\mathrm{e}^{-2\pi\mathrm{i}E_0 t/h} + \sin\beta\psi_2(x)\mathrm{e}^{-2\pi\mathrm{i}E_2 t/h})$$

(2) 可能测到的能量为 $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ 和 $E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega$. 相对概率为

$$\frac{P_0}{P_2} = \frac{\cos^2\beta}{\sin^2\beta} = \cot^2\beta$$

(3) 由于 $\psi(x,0)$ 仅为 $\psi_0(x)$ 与 $\psi_2(x)$ 的组合，因此

$$\psi(-x,0) = \psi(x,0)$$

$t=0$ 时

$$\langle x\rangle = (\psi(x,0), x\psi(x,0)) = 0$$

平均值不随时间变化.

2.35　谐振子随时间的演化(2)

题 2.35　(1) 对一个一维谐振子势 $V = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ 中质量为 m 的粒子，利用谐振子本征态 $\phi_n(x)$，写出时间相关 Schrödinger 方程的最一般解 $\psi(x,t)$. (2) 利用(1)证明 x 的期望值 $\langle x\rangle$ 作为时间的函数，可写成 $A\cos\omega t + B\sin\omega t$ 形式，其中 A、B 为常数. (3) 利用(1)证明对一般的 $\psi(x,t)$ 势能对时间的平均满足 $\langle V\rangle = \frac{1}{2}\langle E\rangle$. 注意等式

$$\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\phi_n = \sqrt{\frac{n+1}{2}}\phi_{n+1} + \sqrt{\frac{n}{2}}\phi_{n-1}$$

解　(1) Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = H\psi(x,t)$$

H 不显含 t，则

$$\psi(x,t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}\psi(x,0)$$

展开 $\psi(x,0)$

$$\psi(x,0)=\sum_n a_n\phi_n(x)$$

而

$$H\phi_n(x)=E_n\phi_n(x),E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

因此

$$\psi(x,t)=\sum_n a_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}\phi_n(x)$$

(2)

$$\begin{aligned}\langle x\rangle&=\int \mathrm{d}x\psi^*(x,t)x\psi(x,t)=\sum_{nn'}a_u^*a_{n'}\mathrm{e}^{-2\pi\mathrm{i}(E_{n'}-E_n)t/\hbar}\int \mathrm{d}x\phi_n^*(x)x\phi_{n'}(x)\\&=\sum_{nn'}a_u^*a_{n'}\mathrm{e}^{-2\pi\mathrm{i}(E_{n'}-E_n)t/\hbar}\left(\sqrt{\frac{n'+1}{2}}\delta_{n,n'+1}+\sqrt{\frac{n'}{2}}\delta_{n,n'-1}\right)\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\\&=\sum_n a_u^*\left(a_{n-1}\sqrt{\frac{n}{2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}+a_{n+1}\sqrt{\frac{n+1}{2}}\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\right)\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}=A\cos\omega t+B\sin\omega t\end{aligned}$$

其中

$$A=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\sum_n a_u^*\left(a_{n-1}\sqrt{\frac{n}{2}}+a_{n+1}\sqrt{\frac{n+1}{2}}\right)$$

$$B=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\sum_n \mathrm{i}a_u^*\left(a_{n-1}\sqrt{\frac{n}{2}}+a_{n+1}\sqrt{\frac{n+1}{2}}\right)$$

(3) 势能对时间平均应理解为算符 V 对 $\psi(x,t)$ 的系统平均值再对时间 t 平均. 由于体系状态具有 $T_\omega=\dfrac{2\pi}{\omega}$ 的时间周期，故时间平均只需在一个周期内进行. 按题中符号，A 的时间平均记为 $\langle A\rangle$，A 的系统平均记为 $\overline{A}$.

$$\begin{aligned}V|\psi\rangle&=\frac{1}{2}\hbar\omega\cdot\frac{m\omega}{\hbar}x^2|\psi\rangle\\&=\frac{1}{2}\hbar\omega\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\sum_{n=0}^{\infty}a_n\left(\sqrt{\frac{n+1}{2}}|n+1\rangle+\sqrt{\frac{n}{2}}|n-1\rangle\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(n+1/2)t}\\&=\frac{1}{2}\hbar\omega\sum_{n=0}^{\infty}a_n\left[\frac{\sqrt{(n+1)(n+2)}}{2}|n+2\rangle\quad+\left(n+\frac{1}{2}\right)|n\rangle+\frac{\sqrt{n(n-1)}}{2}|n-2\rangle\right]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt/\hbar}\end{aligned}$$

所以

$$\begin{aligned}\overline{V}&=\langle\psi|V|\psi\rangle=\frac{1}{2}\hbar\omega\sum_{n=0}^{\infty}a_n^*a_n\left(n+\frac{1}{2}\right)+\frac{1}{2}\hbar\omega\sum_{n=0}^{\infty}a_{n+2}^*\\&\quad\cdot a_n\sqrt{\frac{(n+1)(n+2)}{4}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\omega t}+\frac{1}{2}\hbar\omega\sum_{n=0}^{\infty}a_n\quad\cdot a_{n+2}^*\sqrt{\frac{(n+1)(n+2)}{4}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\omega t}\\&=\frac{1}{2}\hbar\omega\sum_{n=0}^{\infty}a_n^*a_n\left(n+\frac{1}{2}\right)\ +\frac{1}{2}\hbar\omega\sum_{n=0}^{\infty}\left|a_n^*a_n\right|\sqrt{(n+1)(n+2)}\cos(2\omega t+\delta_n)\end{aligned}$$

式中δ_n是$a_{n+1}^*a_n$的位相. 将$\overline{V}$对一个周期平均，第二项为零

$$\langle V\rangle=\frac{1}{T_\omega}\int_0^{T_\omega}\overline{V}\mathrm{d}t=\frac{1}{2}\hbar\omega\sum_{n=0}^{\infty}a_n^*a_n\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

另一方面

$$E=\langle\psi|H|\psi\rangle=\hbar\omega\sum_{n=0}^{\infty}a_n^*a_n\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

得

$$\langle E\rangle=\overline{E}$$

两者相比较最后得

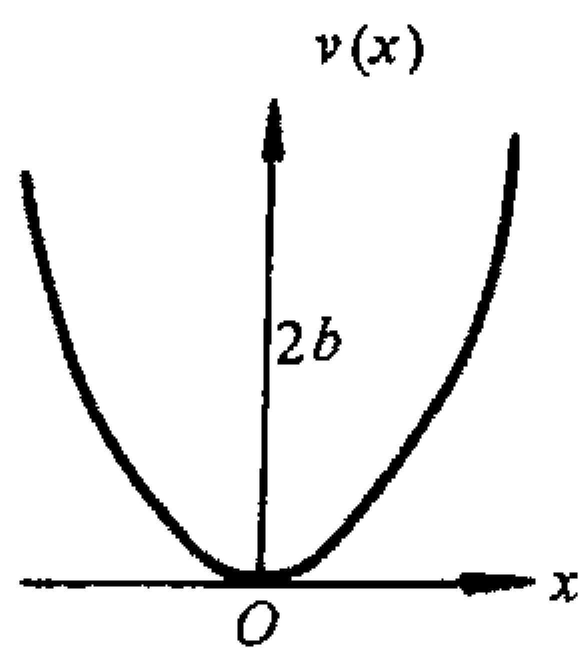
$$\langle V\rangle=\frac{1}{2}\langle E\rangle$$

2.36　谐振子势中心加一个很高很薄势垒

题 2.36　考虑在一维势中运动的粒子，如题图 2.36 所示

$$V(x)=\begin{cases}\frac{1}{2}m\omega^2x^2, & |x|>b\\ V_0, & |x|<b\end{cases}$$

其中$V_0\gg\hbar^2/mb^2\gg\hbar\omega$，也就是说，在谐振子势中心有一很高、很薄、几乎不可穿透的势垒. (1) 在势垒完全不可穿透的近似下，低能量谱是什么？(2) 定性描述由于势垒有有限的穿透率时对能谱产生的效应.



题图 2.36

解　(1) 势垒完全不可穿透. 此时势相当于两个具有一壁为无限高的半谐振子势. 低能谱对应于通常谐振子的奇量子数$(2n+1)$的情况，即

$$E_n=\left(2n+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega,\qquad n=0,1,2,\cdots$$

能级是二度简并的. 波函数在坐标原点均为零.

(2) 势垒有一个小的穿透. 显然与无势垒时相比，粒子在$|x|<b$内出现的概率变小，相对地说，在势垒外出现的概率变大. 粒子的态中混入了少量的偶宇称解，但在原点附近，偶宇称态的概率分布值将大于奇宇称态的概率分布值. 与之相应，在(1)中能级上，也将混入少量的

$$E_n'=\left(2n+\frac{1}{2}\right)$$

数值. 由于$\langle\psi|$矩形势垒$|\psi\rangle\neq0$，此势垒的加入，所有能级均要上移. 在题设条件下，偶宇称态成分的能级移动大于奇宇称态成分的能级移动. 并且，随着能量的升高，能级上移也逐步变小(对同一宇称态而言).

2.37 与给定的谐振子本征态能级相邻的本征态

题 2.37 谐振子的 Hamilton 量可以用无量纲单位 $(m=\hbar=\omega=1)$ 写成

$$\hat{H}=\left(\hat{a}^{\dagger}\hat{a}+\frac{1}{2}\right)$$

其中 $\hat{a}\equiv\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x}+\mathrm{i}\hat{p})$，$\hat{a}^{\dagger}\equiv\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x}-\mathrm{i}\hat{p})$. 某个未归一化的能量本征函数为

$$\psi_a=(2x^3-3x)\mathrm{e}^{-x^2/2}$$

求能量最接近 ψ_a 的另外两个非归一化本征函数.

解 首先考察 ψ_a 对应的占有数是多少

$$\begin{aligned}\hat{a}^{\dagger}\hat{a}\psi_a&=\frac{1}{2}\left(x-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\left(x+\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)(2x^2-3x)\mathrm{e}^{-x^2/2}\\&=\frac{1}{2}\left(x-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)(6x^2-3)\mathrm{e}^{-x^2/2}\\&=3(2x^3-3x)\mathrm{e}^{-x^2/2}=3\psi_a\end{aligned}$$

可见 ψ_a 对应的占有数是 3. 所以，与 ψ_a 最相近的两个本征函数的占有数分别为 2 和 4，波函数为

$$\psi_1=\hat{a}\psi_a=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(x+\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)(2x^3-3x)\mathrm{e}^{-x^2/2}\sim(2x^2-1)\mathrm{e}^{-x^2/2}$$

$$\psi_2=\hat{a}^{\dagger}\psi_a=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(x-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)(2x^3-3x)\mathrm{e}^{-x^2/2}\sim(4x^4-12x^2+3)\mathrm{e}^{-x^2/2}$$

上面的结果已将无关紧要的常数因子略去.

2.38 谐振子随时间的演化

题 2.38 在 $t=0$ 时，处于势 $V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ 中的粒子由波函数

$$\psi(x,0)=A\sum_n\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^n\psi_n(x)$$

描述. $\psi_n(x)$ 是能量为

$$E_n=\left(\frac{1}{2}+n\right)\hbar\omega$$

的能量本征态，$(\psi_n,\psi'_n)\delta_{nn'}$. (1) 求归一化常数 A. (2) 给出 $t>0$ 时 $\psi(x,t)$ 的表示式. (3) 证明 $|\psi(x,t)|^2$ 是时间的周期函数，指出最大周期 T. (4) 求 $t=0$ 时的能量期待值.

解 (1)
$$(\psi(x,0),\psi(x,0))=|A|^2\sum_{mn}\left(\frac{1}{2}\right)^{(m+n)/2}(\psi_n,\psi_m)=2|A|^2$$

取 A 为正实数

$$A=\frac{1}{\sqrt{2}}$$

(2)
$$\psi(x,t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}\psi(x,0)=\sum_n\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^{n+1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t\left(n+\frac{1}{2}\right)}\psi_n(x)$$

(3)
$$|\psi(x,t)|^2=\sum\left(\frac{1}{2}\right)^{\frac{m+n}{2}+1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t(n-m)}\psi_n(x)\psi_m^*(x)$$

显然 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t(n-m)}$ 是时间的周期函数. 最大周期为 $\frac{2\pi}{\omega}$.

(4)
$$\overline{H}=(\psi(x,0),\hat{H}\psi(x,0))=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{2^{n+1}}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

注意到

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{x^n}=\frac{x}{x-1}$$

于是

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{-n}{x^{n+1}}=\frac{-1}{(x-1)^2}$$

从而得

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{n}{2^{n+1}}=1$$

代入 $\overline{H}$ 式中

$$\overline{H}=\frac{3}{2}\hbar\omega$$

2.39 谐振子基态和第一激发态波函数在 p 表象中的形式

题 2.39 一维谐振子基态和第一激发态在坐标表象中的波函数分为

$$\psi_0(x)=\left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$$

$$\psi_1(x)=\left(\frac{4\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\alpha x\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$$

求它们在动量表象中的形式 $\varphi_0(p)$ 和 $\varphi_1(p)$.

解 由

$$\varphi(p)=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}px}\mathrm{d}x$$

有

$$\varphi_0(p)=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\frac{1}{2}\alpha^2x^2-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px\right]\mathrm{d}x$$

由广义 Gauss 积分公式

$$J_0=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\lambda x^2-\theta x}\mathrm{d}x=\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}\mathrm{e}^{\frac{\theta^2}{4\lambda}}$$

其中

$$\lambda,\theta\in C,\qquad \mathrm{Re}\,\lambda>0$$

$$\phi_0(p)=\left(\frac{\beta^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\beta^2p^2}$$

这里

$$\beta=\frac{1}{\hbar\alpha}$$

$$\phi_1(p)=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{4\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\alpha\int_{-\infty}^{\infty}x\exp\left[-\frac{1}{2}\alpha^2x^2-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px\right]\mathrm{d}x$$

$$=-\mathrm{i}\left(\frac{4\beta^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\beta p\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\beta^2p^2}$$

上式利用了

$$J_1=\int_{-\infty}^{\infty}x\mathrm{e}^{-\lambda x^2-\theta x}\mathrm{d}x=-\frac{\partial}{\partial\theta}J_0$$

亦可利用 Fourier 积分性质，若 $F[\psi(x)]=\phi(p)$，则 $F[x\psi(x)]=\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\phi(p)$.

2.40　两个能量本征态的能级差

题 2.40　已知描述单粒子一维束缚态的两个本征波函数分别为 $\psi_1=A\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$，$\psi_2=B(x^2+bx+c)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$，其中 A，B，b，c 均为实常数，$-\infty<x<\infty$，试确定 b，c 的取值和两个态的能量差 E_2-E_1.

解　依题意可得

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\right]\psi_1(x)=E_1\psi_1(x)\tag{1}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\right]\psi_2(x)=E_2\psi_2(x)$$

由式(1)得

$$V(x)=E_1+(\alpha^2x^2-1)\frac{\hbar^2}{2m}$$

显然$V(-x)=V(x)$，具有空间反演不变性，故$b=0$.

由$\langle\psi_1|\psi_2\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_1^*(x)\psi_2(x)\mathrm{d}x=0$，可有$c=-\dfrac{1}{2\alpha}$，故

$$\psi_2(x)=B\left(x^2-\frac{1}{2\alpha}\right)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$$

最后解出$E_2-E_1=\dfrac{2\alpha^2\hbar^2}{m}$，另外由节点定理，可直接断定，$\psi_1$无节点，故为基态，事实上$\psi_1$是一维谐振子的基态波函数，$\psi_2$可能有两个节点，因为

$$x^2+bx+c=\left(x+\frac{b}{2}\right)^2+\left(c-\frac{b^2}{4}\right)$$

在一定的条件下，它有两个节点，$x=-\dfrac{b}{2}\pm\sqrt{-c+\dfrac{b^2}{4}}$，于是可以判定$\psi_2$为第二激发态且$c<\dfrac{b^2}{4}$.

2.41　对势场$V(x)=V_0(x/a)^{2n}$，用不确定性关系估计基态能

题 2.41　考虑质量为m的质点在一维势$V(x)=V_0(x/a)^{2n}$中的运动，其中n是正整数，$V_0>0$，在定性讨论能量本征值的分布和相应本征函数的宇称(如果有的话). 用不确定性原理，估计基态能量的数量级. 具体用于$n=1$和$n=\infty$的情况下，说明这时$V(x)$是什么样的，把你的估计同你以前对这些势的知识作一比较.

解　由束缚态和分立谱的知识，$V(x)$中有无限多个束缚态. 能量本征值是分立的. 第m个激发态在$E<V(x)$区域应有m个节点.

$\Delta x\cdot k\sim(m+1)\pi$，但随$m$增大，$\Delta x$也缓慢增大. 由 Virial 定理$2T=2nV$，得

$$k^2\propto(\Delta x)^{2n}\propto\left[\frac{(m+1)\pi}{k}\right]^{2n}$$

所以

$$E\propto k^2\propto(m+1)^{2n/(n+1)}$$

即一般来说随着n增加，能级间隔也增加. 因为$V(-x)=V(x)$，故所有本征态都有确定宇称. 基态和第二、第四、…激发态宇称为偶，其余本征态宇称为奇.

下面用不确定性原理估计基态能量

$$P_x\sim\frac{\hbar}{2b},\qquad b=\sqrt{(\Delta x)^2}$$

$$E=\frac{1}{2\mu}\left(\frac{\hbar}{2b}\right)^2+V_0\left(\frac{b}{a}\right)^{2n}\qquad \mu\text{ 为质量}$$

求极值，即$\dfrac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}b}=0$有

$$-\frac{\hbar}{4\mu b^3}+2nV_0\frac{b^{2n-1}}{a^{2n}}=0, \qquad b=\left(\frac{\hbar^2a^{2n}}{8\mu nV_0}\right)^{\frac{1}{2n+2}}$$

所以

$$E=(n+1)\frac{V_0}{a^{2n}}\left(\frac{\hbar^2a^{2n}}{8\mu nV_0}\right)^{\frac{n}{n+1}}$$

$n=1$时，$V(x)$为谐振子势

$$V(x)=\frac{V_0x^2}{a^2}=\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2$$

上式给出$E=\frac{1}{2}\hbar\omega$，与准确结果一致.

$n=\infty$时，$V(x)$为无限深方势阱，上式给出$E=\frac{\hbar^2}{8\mu a^2}$. 精确结果为$\frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu a^2}$.

2.42 一个关于一维 Schrödinger 方程本征值的定理

题 2.42 下面是一个关于一维 Schrödinger 方程本征值$E_n(E_1<E_2<E_3<\cdots)$的定理.

定理 如果势$V_1(x)$给出本征值E_{1n}, $V_2(x)$给出本征值E_{2n},且有$V_1(x)\leqslant V_2(x)$处处成立，则有$E_{1n}\leqslant E_{2n}$. (1) 证明这个定理. (2) 考虑势

$$U(x)=\frac{1}{2}k\begin{cases}x^2, & |x|<a\\ a^2, & |x|>a\end{cases}$$

求这个势所能具有的束缚态数目. 假设这个数目$N\gg 1$，决定N的上界(或下界).

提示 (1)利用 Hellmann-Feynman 定理，考虑一个含实常数λ的辅助势

$$V(\lambda,x)=(1-\lambda)V_1(x)+\lambda V_2(x)$$

(2) 选择一个可解的比较势，利用此定理.

解 (1) 令$V(\lambda,x)=\lambda V_2(x)+(1-\lambda)V_1(x)$，显然$V(0,x)=V_1(x)$, $V(1,x)=V_2(x)$

$$\frac{\partial V}{\partial\lambda}=V_2(x)-V_1(x)\geqslant 0$$

$$\hat{H}(\lambda)=\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(\lambda,x)$$

$$\hat{H}(\lambda)|n,\lambda\rangle=E_n(\lambda)|n,\lambda\rangle$$

由 Hellmann-Feynman 定理

$$\frac{\mathrm{d}E_n}{\mathrm{d}\lambda}=\left\langle n,\lambda\left|\frac{\partial\hat{H}(\lambda)}{\partial\lambda}\right|n,\lambda\right\rangle$$

$$=\left\langle n,\lambda\left|\frac{\partial V(\lambda,x)}{\partial\lambda}\right|n,\lambda\right\rangle$$

$$=\int\frac{\partial V}{\partial\lambda}|\psi_n(x,\lambda)|^2\,\mathrm{d}x\geqslant 0$$

因为 E_n 关于 λ 是增函数，所以 $E_{1n}=E_n(0)\leqslant E_n(1)=E_{2n}$.

(2) 令 $V(x)=\dfrac{kx^2}{2}$，则 $V(x)\geqslant U(x)$.

设 E_n 为势 $U(x)$ 对应的能级，则有 $E_n\leqslant(n+1/2)\hbar\omega$ $(\omega=\sqrt{k/m})$. $E_n\leqslant ka^2/2$ 对应于束缚态，因为 $E_n\leqslant(n+1/2)\hbar\omega$，所以，在 $(0,ka^2/2)$ 区间内，$U(x)$ 相应的能级数大于 $V(x)$ 相应的能级数，所以解 $(N+1/2)\hbar\omega\leqslant ka^2/2$，将得到束缚态数目的下限 $\left[\dfrac{m\omega a^2}{2\hbar}\right]$.

另外，若取势 $V(x)$ 为一有限深方势阱

$$V(x)=\begin{cases}\dfrac{1}{2}ka^2, & |x|\geqslant a\\ 0, & |x|<a\end{cases}$$

同理可知，$U(x)$ 的束缚态数少于 $V(x)$ 的束缚态数，后者为 $\left[\dfrac{2m\omega a^2}{\pi\hbar}\right]+1$. 所以，束缚态数目上限为 $\left[\dfrac{2m\omega a^2}{\pi\hbar}\right]$ $(N\gg 1$，1 可以略去). 综上，束缚态数目应介于 $\left[\dfrac{m\omega a^2}{2\hbar}\right]$ 和 $\left[\dfrac{2m\omega a^2}{\pi\hbar}\right]$ 之间.

2.43　束缚态存在定理

题 2.43　考虑作一维运动的粒子，Hamilton 量为

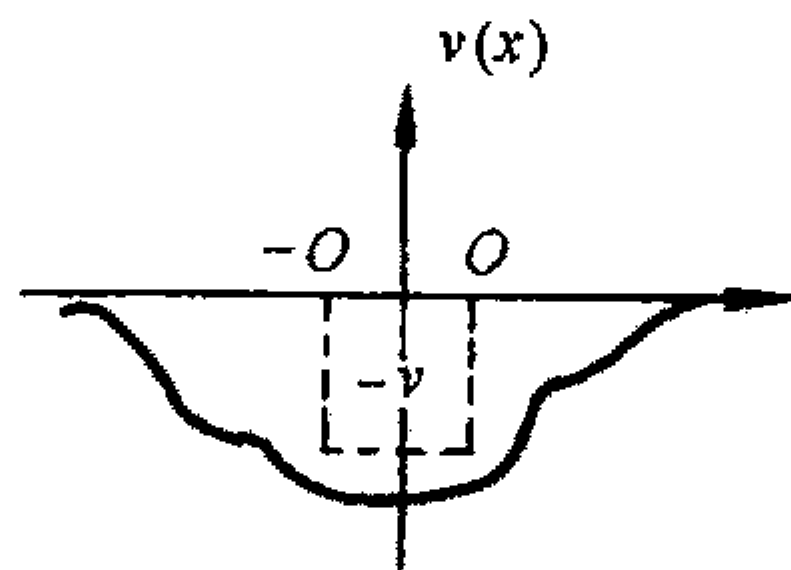
$$H=\frac{p^2}{2m}+V(x)$$

其中 $V(x)\leqslant 0$. 对所有 x 值成立，$V(\pm\infty)=0$. 且 V 并非处处为零. 证明至少存在一束缚态.

解法一　如题图 2.43 所示，$V(x)=f(x)$. 在此势阱内取一方势阱

$$V'(x)=\begin{cases}-V_0, & |x|<a\\ 0, & |x|>a\end{cases}$$

且 $V'(x)\geqslant f(x)$，对所有 x 值成立.



题图 2.43

在势阱 $V'(x)$ 中我们知道至少有束缚态 $\psi(x)$ 存在

$$\langle\psi(x)|H'|\psi(x)\rangle=\langle\psi(x)|\frac{p^2}{2m}+V'(x)|\psi(x)\rangle=E_0<0$$

在 $\psi(x)$ 态下

$$\langle\psi|H|\psi\rangle=\langle\psi|\frac{p^2}{2m}+f(x)|\psi\rangle=\langle\psi|\frac{p^2}{2m}+V'(x)|\psi\rangle=E_0<0$$

令 H 的本征态为 $\cdots\psi_{n-1}(x),\psi_n(x),\cdots$(这里以分立形式表示本征态只是为方便起见，实际上还可以是连续本征态，也可以一部分分立，一部分连续. 对连续情形. 下式中求和应为积分形式)

$$\psi(x)=\sum_n c_n\psi_n(x)$$

所以

$$\langle\psi|H|\psi\rangle=\sum_n^{\infty}|c_n|^2\langle\psi_n|H|\psi_n\rangle<0$$

可见至少有某一态$\psi_i(x)$满足

$$\langle\psi_i|H|\psi_i\rangle<0$$

也即至少有一束缚态存在.

解法二 取试探函数

$$\psi(x)=\left(\frac{b}{\pi}\right)^{1/4}\exp\left(-\frac{1}{2}bx^2\right)$$

用变分法. 计算

$$\begin{aligned}\langle H\rangle&=\left(\frac{b}{\pi}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}bx^2}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\right)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}bx^2}\mathrm{d}x\\&=\left(\frac{b}{\pi}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\frac{\hbar^2 b}{2m}\mathrm{e}^{-bx^2}-\frac{\hbar^2b^2}{2m}x^2\mathrm{e}^{-bx^2}+V(x)\mathrm{e}^{-bx^2}\right)\mathrm{d}x\\&=\frac{\hbar^2 b}{2m}-\frac{\hbar^2b^2}{2m}\left(\frac{b}{\pi}\right)^{1/2}\left(-\frac{1}{2b}\mathrm{e}^{-bx^2}x\Big|_{-\infty}^{+\infty}+\frac{1}{2b}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-bx^2}\mathrm{d}x\right)+\langle V\rangle=\frac{\hbar^2 b}{4m}+\langle V\rangle\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial b}&=\frac{\hbar^2}{4m}+\frac{1}{2b}\langle V\rangle-\left(\frac{b}{\pi}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}x^2V(x)\mathrm{e}^{-bx^2}\mathrm{d}x\\&=\frac{\hbar^2}{4m}+\frac{1}{2b}\langle V\rangle-\langle x^2V\rangle=0\end{aligned}$$

所以

$$b=\frac{\langle V\rangle}{2\left[\langle x^2V\rangle-\frac{\hbar^2}{4m}\right]}$$

以此代入$\langle H\rangle$，得

$$\overline{E}=\langle H\rangle=\frac{2\langle X^2V\rangle\langle V\rangle-\frac{\hbar^2}{4m}\langle V\rangle}{2\left[\langle x^2V\rangle-\frac{\hbar^2}{4m}\right]}$$

因为对任意x值，$V(x)\leqslant 0$，且$V(\pm\infty)=0$，所以

$$\langle V\rangle<0,\qquad\langle x^2V\rangle<0$$

于是

$$2\langle x^2V\rangle\langle V\rangle-\frac{\hbar^2}{4m}\langle V\rangle>0$$

$$\langle x^2V\rangle-\frac{\hbar^2}{4m}<0$$

由 $\overline{E}$，b 的表达式得

$$\overline{E}<0, \qquad b>0$$

其实，此题中的粒子，只要总能量是某些负值(只要大于 $\langle V\rangle$，以使 $\langle T\rangle$ 为正值)，不论 V 的形式如何(在题目所设范围内)，粒子均不可能运动到无限远处，即为束缚态.

2.44 一维势存在束缚态条件的讨论

题 2.44 一个一维吸引势满足

$$V(x)<0, \qquad \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}xV(x)\text{有限}, \qquad \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}xx^2V(x)\text{有限}$$

(1) 用形如 $\exp\left(-\frac{1}{2}\beta x^2\right)$ 的尝试函数证明这个势至少有一个束缚态. (2) 假设势相当弱 $\left(\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}xV(x), \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}xx^2V(x)\text{都很“小”}\right)$，对于这个尝试波函数求能量的最佳上界. (3) 用无量纲的叙述明确表明(2)中“小”的的含义.

解 (1) 取归一化波函数 $\psi(x)=\left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{1/4}\mathrm{e}^{-\beta x^2/2}$，令 $\beta=\frac{m\omega}{\hbar}$，则

$$\begin{aligned}
\overline{H}&=\langle\psi|H|\psi\rangle=\langle\psi|-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)|\psi\rangle\\
&=\left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{1/2}\int\left[\frac{\hbar^2}{2m}(\beta-\beta^2x^2)+V(x)\right]\mathrm{e}^{-\beta x^2}\mathrm{d}x\\
&=\frac{\hbar^2}{4m}\beta+\left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{1/2}\int V(x)\,\mathrm{e}^{-\beta x^2}\mathrm{d}x
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\delta\overline{H}}{\delta\beta}&=\frac{\hbar^2}{4m}+\frac{1}{2\sqrt{\pi\beta}}\int V(x)\mathrm{e}^{-\beta x^2}\mathrm{d}x-\sqrt{\frac{\beta}{\pi}}\int x^2V(x)\,\mathrm{e}^{-\beta x^2}\mathrm{d}x\\
&=\frac{\hbar^2}{4m}+\frac{1}{2\beta}\langle\psi|V(x)|\psi\rangle-\langle\psi|x^2V(x)|\psi\rangle
\end{aligned}$$

由于 $\beta\to0$ 时，$\frac{\delta\overline{H}}{\delta\beta}\to-\infty$；$\beta\to\infty$ 时，$\frac{\delta\overline{H}}{\delta\beta}\to\frac{\hbar^2}{4m}>0$，故 $\frac{\delta\overline{H}}{\delta\beta}=0$ 时，至少有一解 $\beta_0\ (>0)$. 从而尝试波函数适用. 于是，所求的能量为

$$\begin{aligned}
\overline{E}=\overline{H}(\beta_0)&=\frac{\hbar^2\beta_0}{4m}+\langle\psi(\beta_0)|V(x)|\psi(\beta_0)\rangle\\
&=\frac{\hbar^2\beta_0}{4m}+2\beta_0\left[-\frac{\hbar^2}{2m}+\langle\psi(\beta_0)|x^2V(x)|\psi(\beta_0)\rangle\right]\\
&=-\frac{\hbar^2\beta_0}{4m}+2\beta_0\langle\psi(\beta_0)|x^2V(x)|\psi(\beta_0)\rangle\leqslant0
\end{aligned}$$

所以，系统至少存在一个束缚态.

(2) 设 $\int_{-\infty}^{\infty}V(x)\mathrm{d}x=A$，$\int_{-\infty}^{\infty}x^2V(x)\mathrm{d}x=B$. 当 A，B 都很小时，势 $V(x)$ 只能在 $|x|$ 较小处

有可能取较大的值，而在大$|x|$处，$V(x)$必须是快速衰减的，于是

$$A_1=\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\beta x^2}V(x)dx\approx\int_{-\infty}^{\infty}(1-\beta x^2)V(x)dx=A-\beta B$$

$$B_1=\int_{-\infty}^{\infty}x^2e^{-\beta x^2}V(x)dx\approx\int_{-\infty}^{\infty}x^2V(x)dx=B$$

由$\dfrac{\delta\overline{H}}{\delta\beta}=0$，得

$$\frac{\hbar^2}{4m}+\frac{A_1}{2\sqrt{\pi\beta}}-\sqrt{\frac{\beta}{\pi}}B_1=0$$

$$\sqrt{\beta}=\frac{\sqrt{\pi}\hbar^2}{12mB}+\sqrt{\frac{\pi\hbar^4}{144m^2B^2}+\frac{A}{3B}}$$

于是，得到能量的一个估计

$$\overline{E}=-\frac{\hbar^2\beta}{4m}+2\beta\sqrt{\frac{\beta}{\pi}}B$$

$$=\left(\frac{\sqrt{\pi}\hbar^2}{12mB}+\sqrt{\frac{\pi\hbar^4}{144m^2B^2}+\frac{A}{3B}}\right)^2\left(-\frac{\hbar^2}{12m}-\sqrt{\frac{\hbar^4}{36m^2}+\frac{4AB}{3\pi}}\right)$$

对它的最佳下界可如下估计：注意A，B均是负数，故$\overline{E}<0$，于是有

$$\overline{E}<-\frac{\hbar^2}{4m}\left(\frac{\sqrt{\pi}\hbar^2}{12mB}+\sqrt{\frac{\pi\hbar^4}{144m^2B^2}+\frac{A}{3B}}\right)^2$$

由于对任意两实数a，b有$(a+b)^2\geqslant 4ab$，故上界为

$$\overline{E}\leqslant-\frac{\pi\hbar^6}{144m^3B^2}\sqrt{1+\frac{48m^2AB}{\pi\hbar^4}}$$

(3) 由(2)知$\sqrt{\beta}=\dfrac{a_1}{B}+\sqrt{\dfrac{a_2}{B^2}+\dfrac{A}{3B}}$，其中$a_1=\dfrac{\sqrt{\pi}\hbar^2}{12m}$、$a_2=\dfrac{\pi\hbar^4}{144m^2B^2}$，则有

$$\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\beta x^2}V(x)dx\approx\int_{-\infty}^{+\infty}V(x)(1-\beta x^2)dx=A-\beta B$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\beta x^2}V(x)dx\approx V(0)\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\beta x^2}dx\sim\frac{V(0)}{\beta^{1/2}},\qquad \text{略去常系数}\sqrt{\pi}\text{，不影响结果}$$

在一级近似下有

$$\frac{V(0)}{\beta^{1/2}}=A-\beta B$$

$$\left|\frac{V(0)}{\beta^{1/2}A}\right|=\left|1-\frac{\beta B}{A}\right|,\qquad \text{其中}V(0)<0$$

而

$$\frac{\beta B}{A}=\left(\frac{a_1}{B}\sqrt{\frac{B}{A}}+\sqrt{\frac{a_2}{B^2}+\frac{A}{3B}}\frac{B}{A}\right)^2=\left(\frac{a_1}{\sqrt{AB}}+\sqrt{\frac{a_2}{B^2}+\frac{A}{3B}\frac{B}{A}}\right)^2$$

由于 A 、B 皆为小量，故有：$\dfrac{\beta B}{A} \gg 1$，即得 $\left|\dfrac{V(0)}{\beta^{1/2}A}\right| \ll 1$.

对 B 类似的有

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta x^2} x^2 V(x)dx \approx B - \int_{-\infty}^{+\infty} \beta x^4 V(x)dx$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta x^2} x^2 V(x)dx \approx V(0)\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta x^2} x^2 dx \sim V(0)\beta^{-3/2}$$

在一级近似下有

$$V(0)\beta^{-3/2} = B - \int_{-\infty}^{+\infty} \beta x^4 V(x)dx$$

$$\Rightarrow \left|\frac{V(0)}{\beta^{3/2}B}\right| = \left|1 - \frac{\beta}{B}\int_{-\infty}^{+\infty} \beta x^4 V(x)dx\right|$$

又因为 $\left|\dfrac{\beta}{B}\right| \gg 1$，故有

$$\left|\frac{V(0)}{\beta^{3/2}B}\right| \ll 1$$

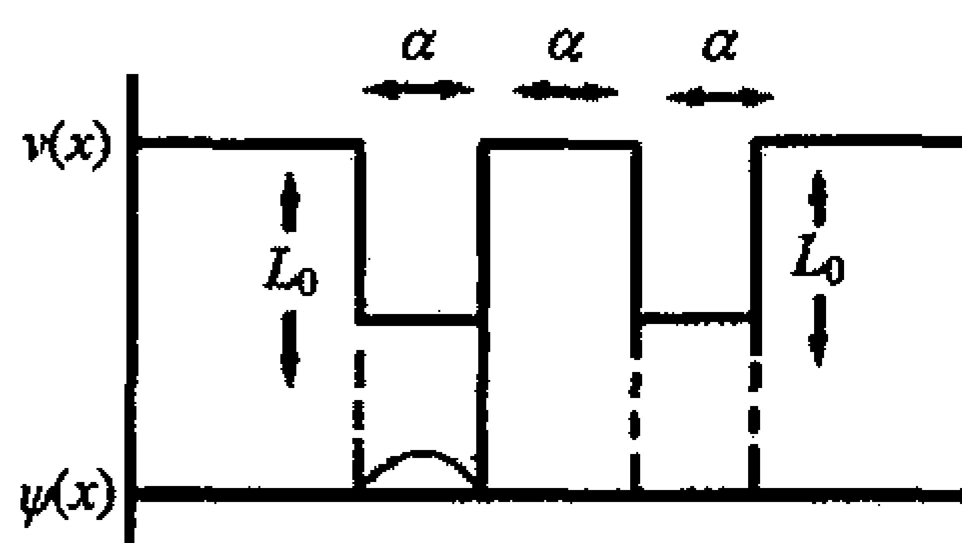
综上有

$$\begin{cases} \left|\dfrac{V(0)}{\beta^{1/2}A}\right| \ll 1 \\ \left|\dfrac{V(0)}{\beta^{3/2}B}\right| \ll 1 \end{cases}$$

此即以无量纲的叙述明确了(2)中“小”的含义.

2.45　双势阱中态的一些讨论

题 2.45　质量为 m 的粒子在 $t=0$ 时刻以下述方式被置于如题图 2.45 所示的双势阱中：其波函数(在 $t=0$ 时)是一正弦曲线(“半个正弦波”)，该正弦曲线的波节在左半势阱的两边缘上，如图所示. (1) 求 $t=0$ 时能量的平均值(用图上定义的符号表示). (2) 在粒子被释放后的时间，能量平均值是常数吗？为什么？(3) 这是具有确定能量的态吗(就是说，对它进行能量测量总是给出同一数值)？为什么？(4) 波函数会从 $t=0$ 时刻的值开始随时间变化吗？如果“变化”，解释你如何去计算波函数的变化，如果“不变化”，解释为什么不变化. (5) 有无可能粒子逃离势阱(从整个势阱，从两个半势阱)？为什么？



题图 2.45

解　(1) $\langle H\rangle_{t=0} = -V_0 - \dfrac{\hbar^2 2}{2m\alpha}\displaystyle\int_0^{\alpha} \sin\left(\frac{\pi x}{\alpha}\right)\frac{d^2}{dx^2}\cdot\sin\left(\frac{\pi x}{\alpha}\right)dx = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m\alpha} - V_0$

(2) $\langle H\rangle$ 是常数，因为 $\dfrac{\partial H}{\partial t} = 0$.

(3) 这不是一个具有确定能量的状态. 因为初始的状态波函数是阱宽为 α 、阱深无限的位阱的能量本征态，并不是这里位阱的能量本征态. 它是本问题的不同能量本征态的叠加态. 因此，对这个状态的每次测量不是均能给出同一能量数值的，而是以一定的概率序列给出一组能量数值.

(4) 波函数的形状将随时间变化. 这是因为符合所给初始条件的解是个叠加态

$$\psi(x,t)=\sum_n c_n\psi_n(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar}$$

$$\psi(x,0)=\sqrt{\frac{2}{\alpha}}\sin\left(\frac{\pi x}{\alpha}\right)=\sum_n c_n\psi_n(x)$$

由于 E_n 随 n 改变，故 $\psi(x,t)$ 的形状将随 t 改变.

(5) 粒子有可能逃离势阱，只要符合如下条件

$$\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma}>V_0$$

就是说，当势阱足够窄(动能大)、势阱不很深(V_0 数值不很大)，粒子总能量为正，即可从整个势阱逃离.

2.46　一维反散射问题

题 2.46　一个质量为 m 的粒子在势 $V(x)$ 的作用下作一维运动. 假如它处在 $E=\dfrac{\hbar^2\gamma^2}{2m}$ 的能量本征态 $\psi(x)=(\gamma^2/\pi)^{1/4}\mathrm{e}^{-\gamma^2x^2/2}$ 上. (1) 求粒子的平均位置；(2) 求粒子的平均动量；(3) 求 $V(x)$ ；(4) 求粒子动量在 $p\to p+\mathrm{d}p$ 之间概率的 $P(p)dp$.

解　(1)

$$\langle x\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)x\psi(x)\mathrm{d}x=\sqrt{\frac{\gamma^2}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\gamma^2x^2}x\mathrm{d}x$$

因为 x 为奇函数，所以上式积分为0.

(2) **解法一**

$$\langle p\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\psi(x)\mathrm{d}x=\mathrm{i}\hbar\sqrt{\frac{\gamma^2}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\gamma^2x^2}\gamma^2x\mathrm{d}x=0$$

解法二　这一结果也可以通过下述考虑给出，因为 $\psi^*=\psi$ （ψ 为实数)，所以，$\langle p\rangle=-\mathrm{i}\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)\psi'(x)\mathrm{d}x$ ，上式左边为实数(p 为可观察量)，而右边为一纯虚数，故必有 $\langle p\rangle=0$. 所以在一维束缚态中 $\langle p\rangle=0$ （一维束缚态波函数，可取为实函数).

(3)

$$E\psi(x)=H\psi(x)=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}^2x}+V(x)\right)\psi(x)$$

$$=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}(-\gamma^2+\gamma^4x^2)+V(x)\right]\psi(x)$$

$$V(x)=\frac{\hbar^2\gamma^4x^2}{2m}$$

(4) 波函数作 Fourier 变换转换到动量空间$\left(积分公式\int_0^{\infty} e^{-\alpha^2x^2}dx=\dfrac{\sqrt{\pi}}{2\alpha}\right)$.

$$\varphi(p)=\sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ipx/\hbar}\psi(x)dx=\sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}}\sqrt[4]{\frac{\gamma^2}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{\gamma^2}{2}\left(x-\frac{ip}{\gamma^2\hbar}\right)^2-\frac{p^2}{2\gamma^2\hbar^2}}dx$$

$$=\sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}}\sqrt[4]{\frac{\gamma^2}{\pi}}\sqrt{\frac{2\pi}{\gamma^2}}e^{-\frac{p^2}{2\gamma^2\hbar^2}}=\sqrt[4]{\frac{1}{\pi\gamma^2\hbar^2}}e^{-\frac{p^2}{2\gamma^2\hbar^2}}$$

$$P(p)dp=\varphi^*(p)\varphi(p)dp=\sqrt{\frac{1}{\pi\gamma^2\hbar^2}}e^{-\frac{p^2}{\gamma^2\hbar^2}}$$

2.47 自由粒子波包随时间的演化

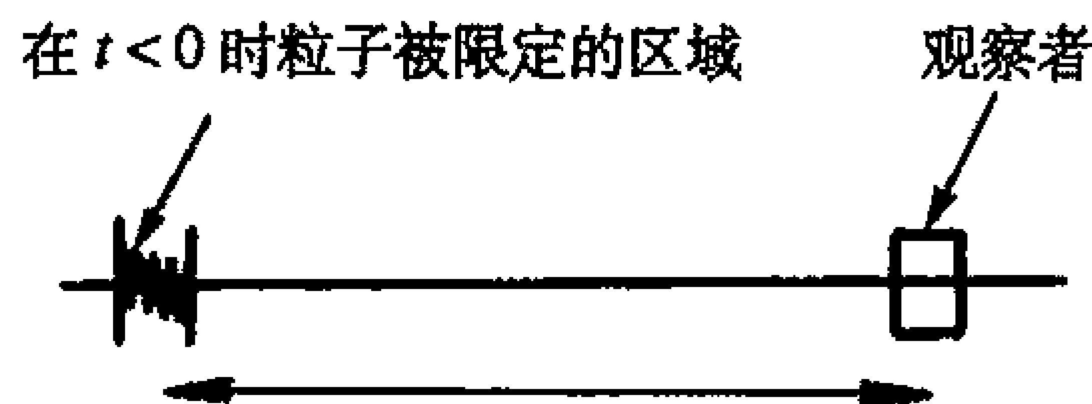
题 2.47 一质量为 m 的粒子处于一维势阱的基态，使得该粒子被限制在一空间小区域内(题图 2.47)，在时刻 $t=0$，该势阱突然消失，使得 $t>0$ 时粒子是自由的，给出在时刻 t，该粒子单位时间内到达一个相距为 L 的观察者的概率公式.

解 设初始 $t=0$ 时刻波函数为 $\psi_0(x)$，则

$$\psi(x,t)=\langle x|e^{-ip^2t/(2m\hbar)}|\psi_0\rangle$$

$$=\int_{-\infty}^{+\infty}\langle x|e^{-ip^2t/(2m\hbar)}|x'\rangle\langle x'|\psi_0\rangle dx'$$

$$=\int_{-\infty}^{+\infty}\langle x|e^{-ip^2t/(2m\hbar)}|x'\rangle\psi_0(x')dx'$$



题图 2.47

而

$$\langle x|e^{-ip^2t/(2m\hbar)}|x'\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}dp'dp\langle x|p'\rangle\langle p'|e^{-ip^2t/(2m\hbar)}|p\rangle\langle p|x'\rangle$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{2\pi\hbar}\exp\left(i\frac{px}{\hbar}-i\frac{px'}{\hbar}-i\frac{p^2t}{2m\hbar}\right)dp$$

$$=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left\{-i\left[p\sqrt{\frac{t}{2m\hbar}}+\frac{(x'-x)\sqrt{m}}{\sqrt{2\hbar t}}\right]^2\right\}dp\cdot\exp\left[i(x'-x)\frac{m}{2\hbar t}\right]$$

$$=\frac{1}{2\pi\hbar}\sqrt{\frac{2m\hbar}{t}}\exp\left[i(x'-x)^2\frac{m}{2\hbar t}\right]\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-iq^2}dq$$

$$=\frac{1-i}{2}\sqrt{\frac{m}{\pi\hbar t}}\exp\left[i(x'-x)^2\frac{m}{2\hbar t}\right]$$

于是

$$\psi(x,t)=\frac{1-i}{2}\sqrt{\frac{m}{\pi\hbar t}}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[i(x'-x)^2\frac{m}{2\hbar t}\right]\cdot\psi_0(x')dx'$$

若令 $\psi_0(x)=\dfrac{1}{\pi^{1/4}\alpha^{1/2}}\exp\left(-\dfrac{x^2}{2\alpha^2}\right)$，即线度为 α 的 Gauss 波包，则代入积分可得

$$\psi(x,t)=\frac{1-\mathrm{i}}{2}\sqrt{\frac{m}{\pi\hbar t}}\cdot\frac{1}{\pi^{1/4}\alpha^{1/2}}\exp\left\{\left(\mathrm{i}\frac{mx^2}{2\hbar t}\right)\left[1-\frac{m}{2\hbar t\left(\frac{m}{2\hbar t}+\frac{\mathrm{i}}{2\alpha^2}\right)}\right]\right\}\cdot\frac{1}{\sqrt{\frac{m}{2\hbar t}+\frac{\mathrm{i}}{2\alpha^2}}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi^2}\mathrm{d}\xi$$

$$=\frac{1}{\pi^{1/4}\alpha^{1/2}}\sqrt{\frac{m}{m+\mathrm{i}\frac{\hbar t}{\alpha^2}}}\exp\left(-\frac{mx^2}{2\alpha^2}\cdot\frac{1}{m+\mathrm{i}\frac{\hbar t}{\alpha^2}}\right)$$

于是流密度为

$$j=\mathrm{Re}\left(\psi^*\frac{p_x}{m}\psi\right)=\frac{\hbar^2xt}{\sqrt{\pi}\alpha^5m^2}\frac{1}{\left(1+\frac{\hbar^2t^2}{m^2\alpha^4}\right)^{3/2}}\cdot\exp\left[-\frac{x^2}{\alpha^2}\cdot\frac{1}{1+\left(\frac{\hbar t}{m\alpha^2}\right)^2}\right]$$

将 $x=L$ 代入，即得 t 时刻的单位时间内粒子到达 L 处的概率.

2.48 自由粒子波包随时间演化的极限形式

题 2.48 质量为 m 的一维自由运动粒子，其初始波函数为 $\psi(x,0)$. (1) 证明：在充分长时间 t 后，粒子的波函数扩散到下列唯一的极限形式

$$\psi(x,t)=\sqrt{\frac{m}{\hbar t}}\exp\left(-\mathrm{i}\frac{\pi}{4}\right)\exp\left(\frac{\mathrm{i}mx^2}{2\hbar t}\right)\varphi\left(\frac{mx}{\hbar t}\right)$$

其中，φ 是初始波函数的 Fourier 变换

$$\varphi(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\psi(x,0)\mathrm{d}x$$

(2) 给出极限值 $\lim_{t\to\infty}|\psi(x,t)|^2$ 合理的物理解释 $\left(\text{提示　当 }\alpha\to\infty\text{ 时，}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha u^2}\to\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}\exp\left(-\mathrm{i}\frac{\pi}{4}\right)\delta(u)\right)$.

解 (1) Schrödinger 方程为

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\right)\psi(x,t)=0$$

经 Fourier 变换

$$\psi(k,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\psi(x,t)$$

方程化为

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\frac{\hbar^2k^2}{2m}\right)\psi(k,t)=0$$

$$\psi(k,t)=\psi(k,0)\exp\left(-\mathrm{i}\frac{k^2\hbar t}{2m}\right)$$

其中

$$\psi(k,0)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\psi(x,0)\equiv\varphi(k)$$

$$\psi(k,t)=\varphi(k)\exp\left(-\mathrm{i}\frac{k^2\hbar t}{2m}\right)$$

所以

$$\begin{aligned}\psi(x,t)&=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}k\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\psi(k,t)\\&=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}k\varphi(k)\exp\left(\mathrm{i}kx-\mathrm{i}\frac{k^2\hbar t}{2m}\right)\\&=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left(\mathrm{i}\frac{mx^2}{2\hbar t}\right)\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}k\cdot\exp\left[-\mathrm{i}\frac{\hbar t}{2m}\left(k-\frac{mx}{\hbar t}\right)^2\right]\varphi(k)\end{aligned}$$

变量代换，令 $\xi=\left(k-\frac{mx}{\hbar t}\right)$

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left(\mathrm{i}\frac{mx^2}{2\hbar t}\right)\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\xi\cdot\exp\left(-\mathrm{i}\frac{\hbar t}{2m}\xi^2\right)\varphi\left(\xi+\frac{mx}{\hbar t}\right)$$

由于当 $\alpha\to\infty$ 时

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha u^2}\to\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}\exp\left(-\mathrm{i}\frac{\pi}{4}\right)\delta(u)$$

因此经充分长时间后($t\to\infty$)

$$\exp\left(-\mathrm{i}\frac{\hbar t}{2m}\xi^2\right)\to\sqrt{\frac{2\pi m}{\hbar t}}\delta(\xi)\cdot\exp\left(-\mathrm{i}\frac{\pi}{4}\right)$$

所以

$$\begin{aligned}\psi(x,t)&=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left(\mathrm{i}\frac{mx^2}{2\hbar t}\right)\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\xi\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}\delta(\xi)\varphi\left(\xi+\frac{mx}{\hbar t}\right)\exp\left(-\mathrm{i}\frac{\pi}{4}\right)\\&=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left(\mathrm{i}\frac{mx^2}{2\hbar t}\right)\sqrt{\frac{2\pi m}{\hbar t}}\exp\left(-\mathrm{i}\frac{\pi}{4}\right)\varphi\left(\frac{mx}{\hbar t}\right)\\&=\sqrt{\frac{m}{\hbar t}}\exp\left(-\mathrm{i}\frac{\pi}{4}\right)\exp\left(\mathrm{i}\frac{mx^2}{2\hbar t}\right)\varphi\left(\frac{mx}{\hbar t}\right)\end{aligned}$$

(2)

$$|\psi(x,t)|^2=\frac{m}{\hbar t}\left|\varphi\left(\frac{mx}{\hbar t}\right)\right|^2$$

由于 $\varphi(k)$ 是 $\psi(x,0)$ 的 Fourier 变换，所以

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\varphi(k)|^2\mathrm{d}k=\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x,0)|^2\,\mathrm{d}x$$

于是一方面

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x,t)|^2\,\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{m}{\hbar t}\left|\varphi\left(\frac{mx}{\hbar t}\right)\right|^2\mathrm{d}x$$

$$=\int_{-\infty}^{+\infty}|\varphi(k)|^2\,\mathrm{d}k=\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x,0)|^2\,\mathrm{d}x$$

表示总概率守恒，另一方面，对 $t\to\infty$ 的极限情况

$$|\psi(x,t)|^2\to 0\cdot|\varphi(0)|^2=0\cdot\frac{1}{2\pi}\left(\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x,0)\mathrm{d}x\right)^2=0$$

表示粒子的波函数将无限地扩散.

2.49　${}_{83}\mathrm{Bi}^{212}$ 的衰变的量子模型

题 2.49　放射性同位素 ${}_{83}\mathrm{Bi}^{212}$ 衰变成 ${}_{81}\mathrm{Tl}^{208}$，同时放出能量为 6MeV 的 α 粒子. (1) 为了计算寿命，首先讨论如题图 2.49(a)所示的有限高势垒. 计算一个质量为 M 的粒子从左面入射的透射系数 T，粒子能量为 E，并设 $T\ll 1$. (2) 利用上面的结果，对 ${}_{83}\mathrm{Bi}^{212}$ 的寿命给一粗略的数值估计，选择敏感的势垒参数来近似 α 粒子势.

解　(1) 若 $T\ll 1$，在 $x=0$ 处的反射就好像势垒为无限厚一样，因而有

$$\psi(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+(t_1-1)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\qquad x<0$$

$$\psi(x)=t_1\mathrm{e}^{-k'x},\qquad 0<x<b$$

其中 $k'=\sqrt{\dfrac{2m(V_0-E_0)}{\hbar^2}}$，$k=\sqrt{\dfrac{2mE_0}{\hbar^2}}$，所以

$$\mathrm{i}k(2-t_1)=-k't_1\qquad 或\ t_1=\frac{2k}{k+\mathrm{i}k'}$$

考虑在 b 处的反射，有

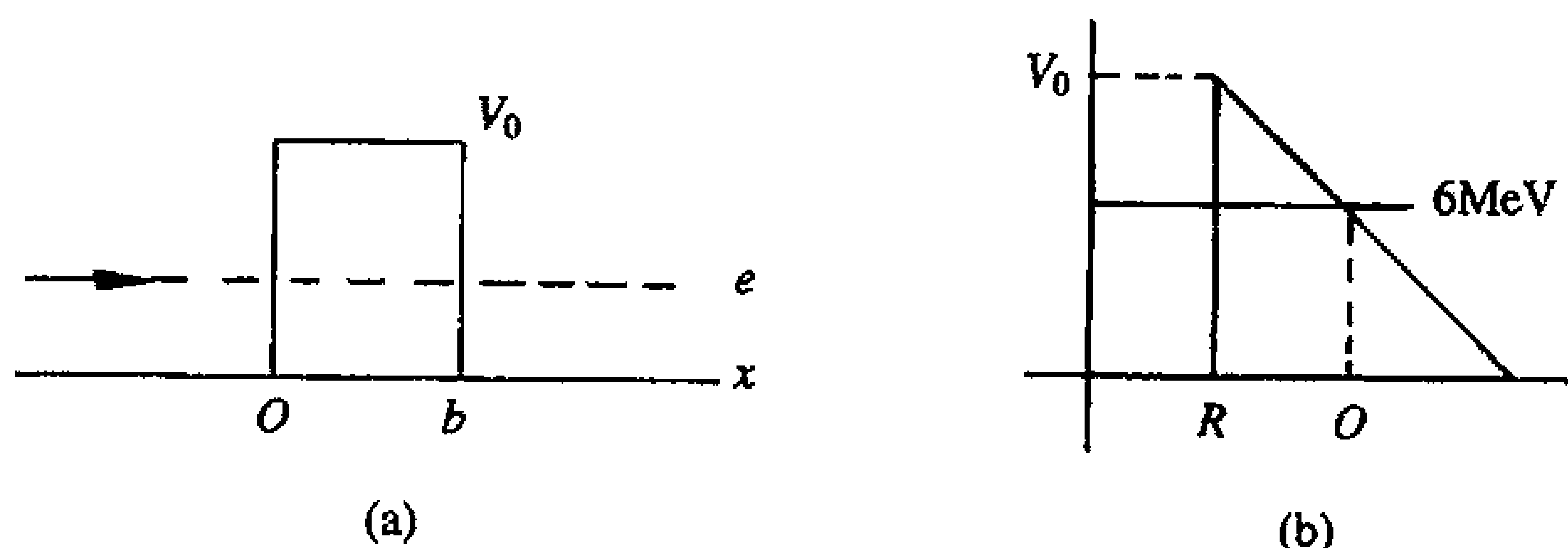
$$\psi(x)=\mathrm{e}^{-k'b}\cdot t_1\left[\mathrm{e}^{-k'(x-b)}+(t_2-1)\mathrm{e}^{k'(x-b)}\right],\qquad 0<x<b$$

$$\psi(x)=t_1t_2\mathrm{e}^{-k'b}\cdot\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x-b)},\qquad x>b$$

$$-k'(2-t_2)=\mathrm{i}kt_2\qquad 或\ t_2=2\mathrm{i}k'/(k+\mathrm{i}k')$$

$$T=t_1t_2\mathrm{e}^{-k'b}$$

$$|T|^2=\frac{16k^2k'^2}{(k^2+k'^2)^2}\mathrm{e}^{-2k'b}=\frac{16E(V_0-E)}{V_0^2}\mathrm{e}^{-2k'b}$$



题图 2.49

(2) 估计 ${}_{83}\mathrm{Bi}^{212}$ 的 α 衰变的速率，如题图 2.49(b)所示，我们可以把静电场(6MeV 的 α 粒子感受到的)视为势垒. 垒宽

$$r_0=\frac{81\times 2\cdot e^2}{6\text{MeV}}=\frac{162}{6\times 137}\cdot\frac{\hbar c}{\text{MeV}}=\frac{162}{822}\cdot\frac{2\times 10^{-11}\text{MeV}\cdot\text{cm}}{\text{MeV}}=3.9\times 10^{-12}\text{cm}$$

Tl 的半径 $R=1\times 10^{-13}\cdot[208]^{1/3}=6\times 10^{-13}\text{cm}$. 这样我们有

$$V_0=6\text{MeV}\times\frac{3.9\times 10^{-12}\text{cm}}{6\times 10^{-13}\text{cm}}=39\text{MeV}$$

假定有

$$V_0R=E_\alpha r_0$$

α 粒子在 $_{81}\text{Tl}^{208}$ 的核内以速度 v 运动，每秒撞壁次数为 $\frac{v}{R}$，这样，每秒就有 $\frac{v}{R}|T|^2$ 的概率跑出去. 所以 $_{83}\text{Bi}^{212}$ 的寿命为

$$\tau\approx\frac{R}{v}\frac{1}{|T|^2}\approx\frac{6\times 10^{-13}}{3\times 10^{10}}\times e^{2k'r_0}$$
$$=2\times 10^{-23}e^{60}=2.3\times 10^3\text{s}$$

2.50　$V(x)=-g[\delta(x-a)+\delta(x+a)]$

题 2.50　质量为 m 的粒子在一维势场 $V(x)=-g[\delta(x-a)+\delta(x+a)]$ 中运动，g 是大于零的常数. 求基态能量本征函数，并导出联系 g 和能量本征值的方程.

解　Schrödinger 方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)-g[\delta(x-a)+\delta(x+a)]\psi(x)=E\psi(x)$$

设 $E<0$，$k=\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$. 在 1, 2, 3 区解得其波函数为

$$\psi(x)=\begin{cases}Ae^{kx}, & x\leqslant -a\\ B\sinh kx+D\cosh kx, & |x|<a\\ Ce^{-kx}, & x\geqslant a\end{cases}$$

将 2 区的波函数分为奇、偶宇称态，由波函数连续：

对奇宇称态

$$Ae^{kx}\Big|_{x=-a}=B\sinh kx\Big|_{x=-a},\qquad Ae^{-ka}=-B\sinh ka$$
$$Ce^{-kx}\Big|_{x=a}=B\sinh kx\Big|_{x=a},\qquad Ce^{-ka}=B\sinh ka$$

得

$$A=-C,\qquad B=\frac{Ce^{-ka}}{\sinh ka}$$

对偶宇称态

$$Ae^{kx}\Big|_{x=-a}=D\cosh kx\Big|_{x=-a},\qquad Ae^{-ka}=D\cosh ka$$
$$Ce^{-kx}\Big|_{x=a}=D\cosh kx\Big|_{x=a},\qquad Ce^{-ka}=D\cosh ka$$

得

$$A = C, \qquad D = \frac{Ce^{-ka}}{\cosh ka}$$

在区域$(-a-\varepsilon,-a+\varepsilon)$，$(a-\varepsilon,a+\varepsilon)$分别积分 Schrödinger 方程，得

$$\begin{cases} \psi'(-a+\varepsilon)-\psi'(-a-\varepsilon) = -\dfrac{2mg}{\hbar^2}\psi(-a) \\ \psi'(a+\varepsilon)-\psi'(a-\varepsilon) = -\dfrac{2mg}{\hbar^2}\psi(a) \end{cases}$$

将 1, 2, 3 区的波函数根据奇偶宇称代入得

奇宇称
$$\begin{cases} Bk\cosh k(-a) - Ake^{k(-a)} = -\dfrac{2mg}{\hbar^2}Ae^{k(-a)} \\ -Cke^{-ka} - Bk\cosh ka = -\dfrac{2mg}{\hbar^2}Ce^{-ka} \end{cases}$$

偶宇称
$$\begin{cases} Dk\sinh k(-a) - Ake^{k(-a)} = -\dfrac{2mg}{\hbar^2}Ae^{k(-a)} \\ -Cke^{-ka} - Dk\sinh ka = -\dfrac{2mg}{\hbar^2}Ce^{-ka} \end{cases}$$

化简后得

$$\begin{cases} \dfrac{k\hbar^2}{mg} = 1 - e^{-2ka}, & \text{奇宇称态} \\ \dfrac{k\hbar^2}{mg} = 1 + e^{-2ka}, & \text{偶宇称态} \end{cases}$$

因为$E \propto k^2$，且$E<0$，所以偶宇称态能级更低，偶宇称态为基态，所以基态波函数为

$$\psi(x) = \begin{cases} D\cosh ka e^{ka} e^{-k|x|}, & |x| > a \\ D\cosh kx, & |x| \leqslant a \end{cases}$$

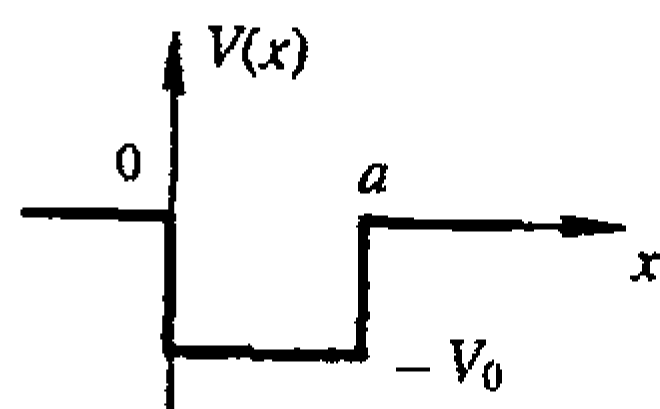
由波函数归一化求系数D

$$2\int_a^{+\infty}(D\cosh kae^{ka}e^{-kx})^2 dx + \int_{-a}^{a}(D\cosh kx)^2 dx = 1$$

$$D = \left[\frac{e^{2ka}+2ka+1}{2k}\right]^{-1/2}$$

2.51　方势阱的透射

题 2.51　考虑一维方势阱如题图 2.51 所示



题图 2.51

$$V = \begin{cases} 0, & x<0 \\ -V_0, & 0<x<a \\ 0, & x>a \end{cases}$$

其中$V_0>0$. 如果一质量为m、动能为E的非相对论粒子从左入射，问透射概率为多少？E为何值时该概率为 1？

解
$$\psi(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+R\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx},\qquad x<0$$
$$\psi(x)=S\mathrm{e}^{+\mathrm{i}kx},\qquad x>a$$
$$\psi(x)=A\mathrm{e}^{+\mathrm{i}k'x}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'x},\qquad 0<x<a$$

其中
$$k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}},\qquad k'=\sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}$$

由边界条件确定 R,S,A,B，$x=0$ 点及 $x=a$ 点 $\psi(x)$，$\psi'(x)$ 连续
$$\begin{cases}1+R=A+B\\ k(1-R)=k'(A-B)\\ A\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'a}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'a}=S\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}\\ k'(A\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'a}-B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'a})=kS\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'a}\end{cases}$$
$$S=\frac{4kk'\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}}{(k+k')^2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'a}-(k-k')^2\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'a}}$$

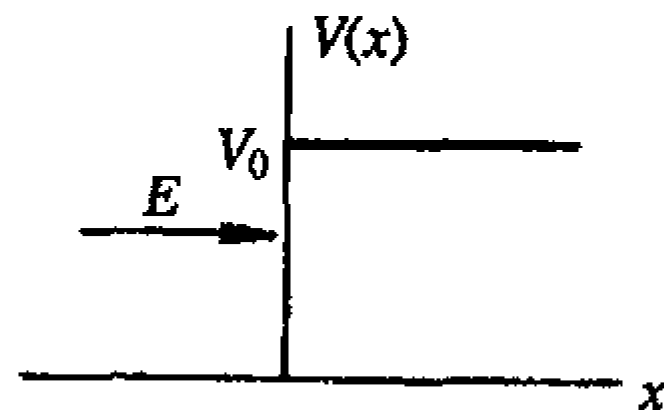
透射概率为
$$P=|S|^2=\frac{4k^2k'^2}{4(kk'\cos k'a)^2+(k^2-k'^2)^2\sin^2(k'a)}$$

要达到共振透射，必须满足 $k'a=n\pi$，即入射粒子动能 $E=\dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m\alpha}-V_0$ 时，发生共振透射，粒子的透射概率 $P=1$.

2.52　势阱的透射和反射

题 2.52　考虑势能为 $V(x)$ 的一维系统
$$V(x)=\begin{cases}V_0, & x>0\\ 0, & x<0\end{cases}$$
其中 V_0 为正常数. 若一能量为 E 的粒子束从 $x=-\infty$ 处入射，其透射率和反射率各为多少? 考虑 E 的所有可能值.

解　如题图 2.52 所示



题图 2.52

$$V(x)=\begin{cases}V_0, & x>0\\ 0, & x<0\end{cases}$$
$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi=0$$

可令
$$\psi(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+r\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\left(k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\right)$$

当 $x>0$ 时
$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi+\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\psi=0$$

(1) $E<V_0$

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi-\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}\psi=0$$

考虑到 $x\to\infty$时 $\psi(x)$有限，得

$$\psi(x)=t\mathrm{e}^{-k'x},\qquad k'=\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$$

由连续性条件

$$\begin{cases}1+r=t\\ \mathrm{i}k-\mathrm{i}kr=-tk'\end{cases}$$

得

$$r=\frac{k'+\mathrm{i}k}{\mathrm{i}k-k'}=\frac{1-\mathrm{i}k'/k}{1+\mathrm{i}k'/k}$$

所以反射率

$$R=|r|^2=1$$

透射率

$$T=1-R=0$$

(2) $E>V_0, x>0$

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\right)\psi(x)=0$$

$$\psi(x)=t\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'x},\qquad k'=\sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$$

(考虑到 $x\to+\infty$ 时只有出射波)

$$\begin{cases}1+r=t\\ \mathrm{i}k-\mathrm{i}kr=\mathrm{i}k't\end{cases}$$

得

$$r=\frac{k'-k}{k'+k}$$

所以反射率

$$R=\left(\frac{k'-k}{k'+k}\right)^2$$

透射率

$$T=1-R=\frac{4kk'}{(k+k')^2}$$

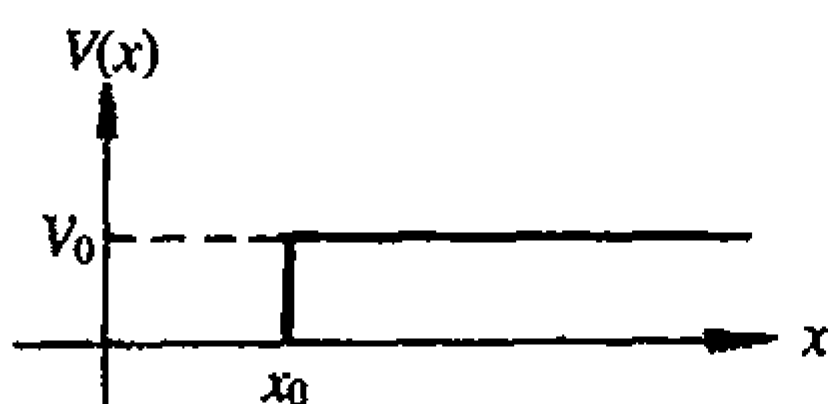
2.53 势阱的反射

题 2.53 一质量为 m、动量为 p 的粒子从左射入阶跃状势垒，计算下列两种情况下粒子向后散射的概率：(1) $\frac{p^2}{2m}<V_0$； (2) $\frac{p^2}{2m}<V_0$.

解　如题图 2.53 所示，Schrödinger 方程为

$$\left(\frac{d^2}{dx^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}\right)\psi(x)=0, \qquad x<x_0$$

$$\left[\frac{d^2}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)\right]\psi(x)=0, \qquad x>x_0$$



题图 2.53

(1) $E<V_0$

$$\psi(x)=\begin{cases} e^{ik(x-x_0)}+re^{-ik(x-x_0)}, & x<x_0 \quad \left(k=\sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}\right) \\ te^{-k'(x-x_0)}, & x>x_0 \quad \left(k'=\sqrt{\dfrac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}\right) \end{cases}$$

其中考虑了 $x\to+\infty$ 时 $\psi(x)$有限条件. 连续性条件为

$$\begin{cases} 1+r=t \\ ik-ikr=-k't \end{cases}$$

所以

$$r=\frac{k'+ik}{ik-k'}$$

反射概率

$$R=|r|^2=1$$

(2) $E>V_0$

$$\psi(x)=\begin{cases} e^{ik(x-x_0)}+re^{-ik(x-x_0)}, & x<x_0 \quad \left(k=\sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}\right) \\ te^{ik'(x-x_0)}, & x>x_0 \quad \left(k'=\sqrt{\dfrac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}\right) \end{cases}$$

(考虑到 $x>x_0$ 时只有出射波)

$$\begin{cases} 1+r=t \\ ik-ikr=ik't \end{cases}$$

所以

$$r=\frac{k-k'}{k+k'}$$

反射概率

$$R=|r|^2=\left(\frac{k'-k}{k'+k}\right)^2$$

2.54 粒子自势阶方向入射时的透射、反射

题 2.54 若粒子从右边入射，求一维阶梯势的反射和透射系数，一维阶梯势为

$$V(x)=\begin{cases}V_0, & x>0 \quad (V_0>0)\\ 0, & x<0\end{cases}$$

解 粒子从右边入射，所以 $E>V_0$

$$\text{入射波} \qquad \psi_{\mathrm{i}}=Ae^{\mathrm{i}k_1x}$$

$$\text{反射波} \qquad \psi_{\mathrm{r}}=Be^{-\mathrm{i}k_1x}$$

$$\text{透射波} \qquad \psi_{\mathrm{t}}=Ce^{\mathrm{i}k_2x}$$

其中

$$k_1=\sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}, \qquad k_2=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

由波函数及波函数的一阶导数连续条件得

$$\begin{cases}Ae^{\mathrm{i}k_1x}\Big|_{x=0}+Be^{\mathrm{i}k_1x}\Big|_{x=0}=Ce^{\mathrm{i}k_2x}\Big|_{x=0}\\ Ak_1e^{\mathrm{i}k_1x}\Big|_{x=0}-Bk_1e^{\mathrm{i}k_1x}\Big|_{x=0}=Ck_2e^{\mathrm{i}k_2x}\Big|_{x=0}\end{cases}$$

得

$$A+B=C, \qquad (A-B)k_1=Ck_2$$

由上式可解出反射系数

$$|R|^2=\left|\frac{B}{A}\right|^2=\left|\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}\right|^2=\left|\frac{\sqrt{E-V_0}-\sqrt{E}}{\sqrt{E-V_0}+\sqrt{E}}\right|^2=\frac{V_0^2}{(\sqrt{E-V_0}+\sqrt{E})^4}$$

透射系数 $|T|^2=1-|R|^2$.

注意 透射系数不能用 $\left|\frac{C}{A}\right|^2$，这是因为，透射系数的定义为 $T=\frac{j_t}{j_i}$，j 是概率流密度，正比于 k，因为势垒两边的波矢不同，所以不是简单的 $\left|\frac{C}{A}\right|^2$.

2.55 势阶反射比率

题 2.55 用量子力学的观点讨论，一质量为 m 的粒子束沿正 x 方向以能量 E 向 $x=0$ 处的势阶动运动. 当 $x\leqslant 0$ 时，该势为 0，$x>0$ 时为 $\frac{3E}{4}$. 问在 $x=0$ 处被反射的粒子比率有多大?

解 Schrödinger 方程为

$$\psi'' + k^2\psi = 0, \quad x \leqslant 0$$

$$\psi'' + \left(\frac{k}{2}\right)^2 \psi = 0, \quad x > 0, \quad \text{势为} \frac{3E}{4}$$

式中 $k = \sqrt{2mE}/\hbar$，合乎题意的解为

$$x \leqslant 0 \text{ 时} \quad \psi = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + r\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$$

$$x > 0 \text{ 时} \quad \psi = t\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx/2}$$

由波函数在 $x = 0$ 处的边界条件，有

$$\begin{cases} 1 + r = t \\ k(1 - r) = \dfrac{k}{2} t \end{cases}$$

所以

$$r = \frac{1}{3}$$

粒子被反射的比率为 $\frac{1}{9}$.

2.56　势垒的透射

题 2.56　考虑一个近似由平面波描述的粒子束沿 x 轴从左入射到势 $V(x) = \gamma\delta(x)$ 上，$\gamma > 0$. $\delta(x)$ 是 Dirac δ 函数. (1) 给出 $x < 0$ 处波函数的形式. (2) 给出 $x > 0$ 时波函数的形式. (3) 给出波函数在两个区间之间的边界条件. (4) 计算透射概率.

解　(1) 在 $x < 0$ 处有入射波 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$ 和反射波 $R\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$，所以

$$\psi(x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + R\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}, \quad x < 0$$

(2) 在 $x > 0$ 时，只有透射波 $S\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$，所以

$$\psi(x) = S\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}, \quad x > 0$$

(3) Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} \psi(x) + \gamma\delta(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

所以

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = \frac{2m\gamma}{\hbar^2} \psi(0)$$

波函数在 $x = 0$ 连续

$$\psi(0^+) = \psi(0^-)$$

(4) 由(1)、(2)和(3)

$$1 + R = S$$

$$\mathrm{i}kS - \mathrm{i}k(1 - R) = \frac{2m\gamma}{\hbar^2} S$$

解得

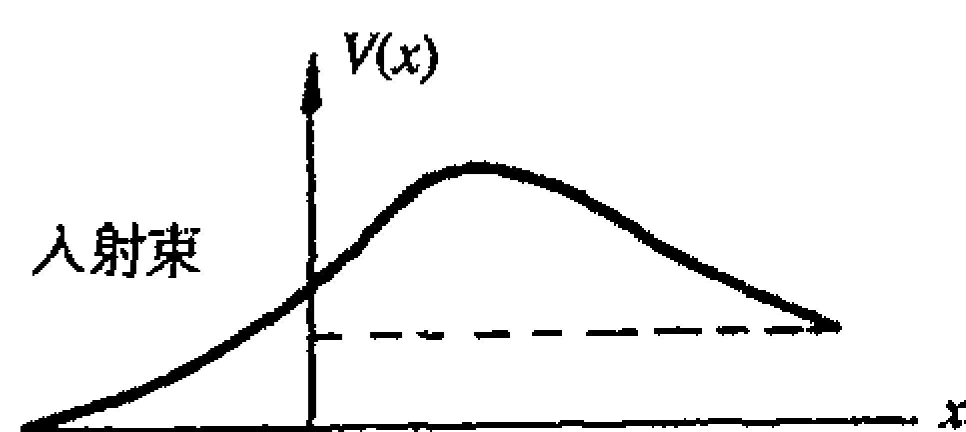
$$S=\left(1+\frac{\mathrm{i}m\gamma}{\hbar^2 k}\right)^{-1}$$

透射系数为

$$T=|S|^2=\left(1+\frac{m^2\gamma^2}{\hbar^4 k^2}\right)^{-1}=\left(1+\frac{m\gamma^2}{2E\hbar^2}\right)^{-1}$$

2.57 一维散射的能量守恒

题 2.57 考虑一个质量为 m 的粒子入射到如题图 2.57 所示的势的一维问题. 假定粒子能量在 $x\to-\infty$ 时大于 V_0，V_0 为势当 $x\to\infty$ 时的渐近值. 证明反射和透射强度之和等于入射强度.



题图 2.57

解 设在 $x\to-\infty$ 时，$\psi\to \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+r\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$；$x\to+\infty$ 时，$\psi\to t\mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta x}$. 入射强度定义为单位时间内入射的粒子数 $I=\dfrac{\hbar k}{m}$. 类似地，反射强度和透射强度分别为 $R=|r|^2\dfrac{\hbar k}{m}$，$T=|t|^2\dfrac{\hbar\beta}{m}$.

将 Schrödinger 方程乘以 ψ^*

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi^*\nabla^2\psi+\psi^*V\psi=E\psi^*\psi$$

将其共轭方程乘以 ψ

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi\nabla^2\psi^*+\psi^*V\psi=E\psi^*\psi$$

两式相减，得到

$$\psi^*\nabla^2\psi-\psi\nabla^2\psi^*=\nabla(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)=0$$

$\psi^*\dfrac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}-\psi\dfrac{\mathrm{d}\psi^*}{\mathrm{d}x}$ 处处相等. 特别地，将 ψ 在 $\pm\infty$ 处的渐近形式代入，有

$$k(1-|r|^2)=\beta|t|^2$$

所以

$$I=R+T$$

2.58 $v(x)=-v_0\mathrm{sech}^2x$ 的 S 矩阵

题 2.58 一维 Schrödinger 方程为 $\left[-\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}-2\mathrm{sech}^2x\right]\psi=\varepsilon\psi\left(\hbar=1,\ m=\dfrac{1}{2}\right)$. (1) 证明 $\mathrm{e}^{ikx}(\tanh x+c)$ 只要选取合适的 c，是一个解. 计算这个问题的 S 矩阵(反射和透射系数). (2) 波函数 $\mathrm{sech}x$ 恰好满足方程，计算相应束缚态的能量. 简单论证这个态必是基态. (3) 扼要说明如果你事先不知道基态波函数的具体形式，如何估计基态能量.

解 (1) 把所给形式的解代入 Schrödinger 方程，不难得出当 $c=-\mathrm{i}k$ 时 $\mathrm{e}^{ikx}(\tanh x+c)=\mathrm{e}^{ikx}(\tanh x-\mathrm{i}k)$ 是方程的一个解，相应的 $\varepsilon=k^2$

$$x\to\infty\text{时},\qquad \psi = e^{ikx}(1-ik)$$
$$x\to-\infty\text{时},\qquad \psi = e^{ikx}(-1-ik)$$

反射系数 $R=0$，透射系数 $T=1$. S 矩阵为

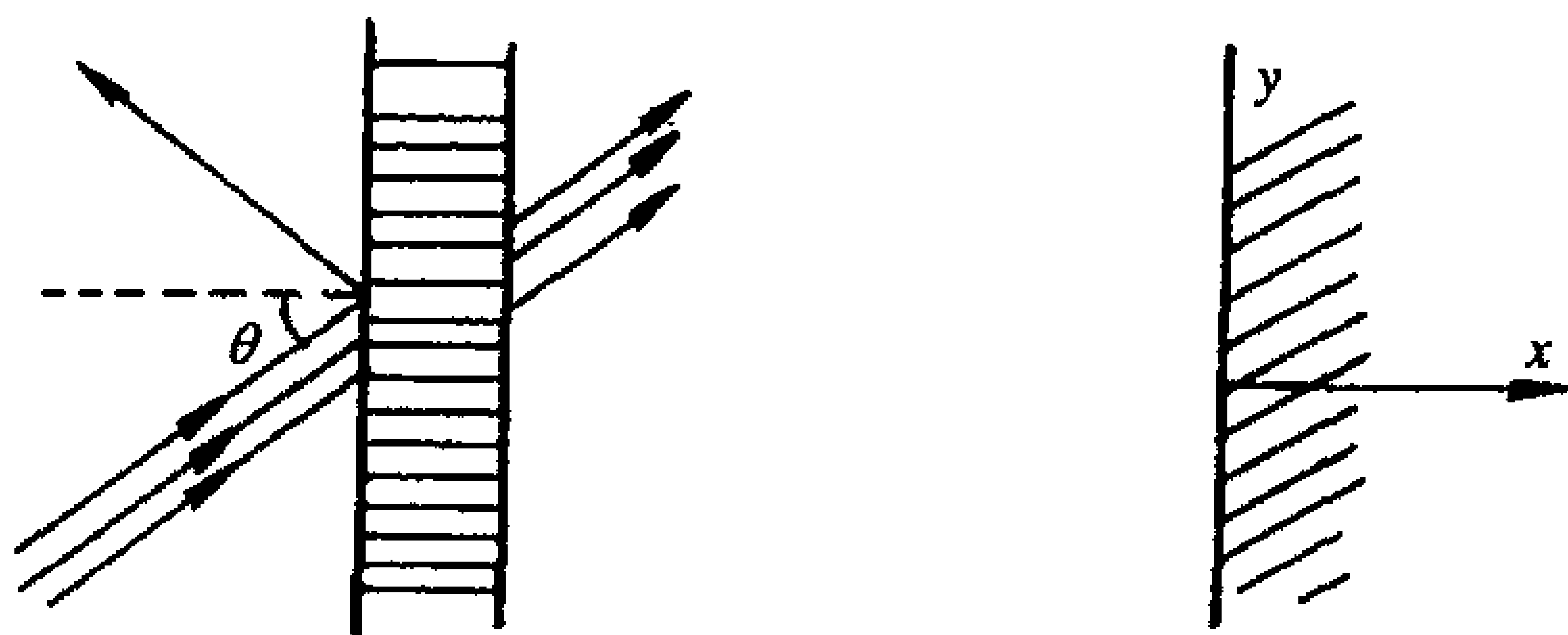
$$\begin{pmatrix} 0 & -\dfrac{1-ik}{1+ik} \\ -\dfrac{1-ik}{1+ik} & 0 \end{pmatrix}.$$

(2) $\varepsilon=-3$. 由于 sech$x$ 为在全 x 空间无节点的束缚态，故必为基态.

(3) 选取一个无节点的带参数的束缚态偶函数，用变分法得出基态能量的近似值.

2.59　中子束在平板上的反射

题 2.59　一束单一能量 E 的非相对论中子打到一个厚度为 t 的平板平面上. 在这平板中，中子在一吸引的均匀势阱中运动，势阱深为 V. 中子束与平板的法线交成 θ 角. 见题图 2.59(a). (1) 如果 $t\to\infty$，有多少中子被反射? (2) 如果 V 势是排斥势，且 $V=E$，有多少中子被反射(令 t 是有限的)?



题图 2.59(a)

解　(1)

$$\psi_{in}(x,y,t) = e^{ik_0\cdot r - i\omega t}$$
$$\psi_{re}(x,t) = Ae^{ik_0\cdot r - i\omega' t}$$

在 $x<0$ 处，波函数为

$$\psi_1(x\cdot y) = e^{ik_0\cos\theta\cdot x + ik_0\cdot\sin\theta\cdot y} + Re^{-ik_0\cos\theta\cdot z + ik_0\cdot\sin\theta\cdot y}$$

在 $x>0$ 处 Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = (E+V)\psi \tag{1}$$

其解为

$$\psi_2 = Te^{ik_x\cdot x + ik_y\cdot y}$$

代入式(1)，得

$$k_x^2 + k_y^2 = \frac{2m(E+V)}{\hbar^2}$$

在 $x=0$ 处，有边界条件

$$\psi_1(0,y)=\psi_2(0,y)$$
$$\frac{\partial\psi_1(0,y)}{\partial x}=\frac{\partial\psi_2(0,y)}{\partial x}$$

得

$$e^{ik_0\cdot\sin\theta\cdot y}+Re^{ik_0\cdot\sin\theta\cdot y}=Te^{ik_y y}$$
$$ik_0\cos\theta e^{ik_0\cdot\sin\theta\cdot y}-R^{ik_0\cos\theta}e^{ik_0\cdot\sin\theta\cdot y}=Tik_x\cdot e^{ik_y y}$$

且

$$k_y=k_0\sin\theta$$

从而有

$$1+R=T$$
$$ik_0(1-R)\cos\theta=T\cdot ik_x$$

即

$$1+R=T$$
$$Tk_x=k_0(1-R)\cos\theta$$

由上二式得

$$R=\frac{k_0\cos\theta-k_x}{k_0\cos\theta+k_x}$$

反射回来的概率为

$$P=|R|^2=\left|\frac{k_0\cos\theta-k_x}{k_0\cos\theta+k_x}\right|^2$$
$$k_x^2=\frac{2m(E+V)}{\hbar^2}-k_0^2\sin^2\theta,\qquad k_0^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$$

(2) **解法一** 在 $x<0$ 时波函数还是(1)中的形式. 在 $0<x<t$ 时 Schrödinger 方程为

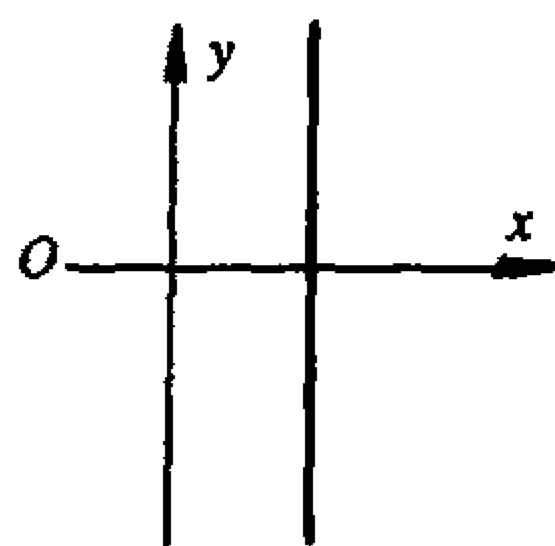
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi=0$$

若ψ取这样的形式：$e^{ik'y}\cdot e^{kx}$，有

$$-k'^2+k^2=0,\qquad k=\pm k'$$

所以 $0<x<t$ 的波函数为

$$\psi_2(x,y)=(ae^{k'x}+be^{-k'x})e^{ik'y}$$



题图 2.59(b)

总起来有

$$x<0,\qquad \phi_1(x)=e^{ik_x x}+re^{-ik_x x}$$
$$0<x<t,\quad \phi_2(x)=ae^{k'x}+be^{-k'x}$$
$$x>t,\qquad \phi_3(x)=ce^{ik_x x}$$

其中

$$k_x=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\cos\theta,\qquad k'=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\cdot\sin\theta$$

这里只写 x 分量. y 分量均为 $e^{ik_y\cdot y}$

$$k_y=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\cdot\sin\theta$$

所有边界条件为

$$\begin{cases}\phi_1(0)=\phi_2(0)\\ \dfrac{\mathrm{d}\phi_1(0)}{\mathrm{d}x}=\dfrac{\mathrm{d}\phi_2(0)}{\mathrm{d}x}\end{cases},\qquad \begin{cases}\phi_2(t)=\phi_3(t)\\ \dfrac{\mathrm{d}\phi_2(t)}{\mathrm{d}x}=\dfrac{\mathrm{d}\phi_3(t)}{\mathrm{d}x}\end{cases}$$

得

$$\begin{cases}1+r=a+b\\ \mathrm{i}k_x(1-r)=k'(a-b)\\ c\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_xt}=a\mathrm{e}^{k't}+b\mathrm{e}^{-k't}\end{cases}$$

$$\mathrm{i}k_x\cdot c\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_xt}=k'a\mathrm{e}^{k't}-k'b\mathrm{e}^{-k't}$$

解得

$$r=\frac{\mathrm{e}^{2k't}-1}{1-\beta^2\mathrm{e}^{2k't}},\qquad \beta=\frac{k'-\mathrm{i}k_x}{k'+\mathrm{i}k_x}$$

$$|R|^2=|r|^2=\frac{\mathrm{e}^{2k't}+\mathrm{e}^{-2k't}-2}{\mathrm{e}^{-2k't}+c^{2k't}-2\cos4\theta}$$

解法二　用无限个振幅叠加的办法可以求解此题，这与光学中 Fabry-Perot 干涉仪的情况类似.

只考虑 x 分量，以 T_{12}，R_{21} 分别表示波从介质 1 到介质 2 的振幅透射及折射系数. T_{21}，R_{21} 表示波从介质 2 到介质 1 的振幅透射及折射系数. 设入射波振幅为 1，见题图 2.59(c)穿过介质 2 出来的波振幅

$$\begin{aligned}T&=T_{12}\mathrm{e}^{-\delta}\cdot T_{21}+T_{12}\mathrm{e}^{-\delta}\cdot R_{21}\mathrm{e}^{-2\delta}R_{21}\cdot T_{21}+T_{12}\mathrm{e}^{-\delta}\cdot(R_{21}\mathrm{e}^{-2\delta}R_{21})^2\cdot T_{21}+\cdots\\&=T_{12}\mathrm{e}^{-\delta}T_{21}[1+R_{21}^2\mathrm{e}^{-2\delta}+(R_{21}^2\mathrm{e}^{-2\delta})^2+\cdots]=T_{12}T_{21}\mathrm{e}^{-\delta}\frac{1}{1-R_{21}^2\mathrm{e}^{-2\delta}}\end{aligned}$$

其中 $\mathrm{e}^{-\delta}$ 是波在介质 2 中从一界面到另一界面的衰减系数

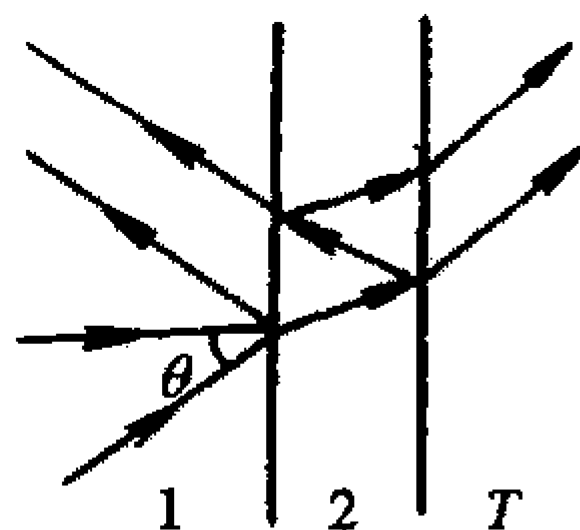
$$\delta=k't,\qquad k'=\sqrt{2mE(1-\cos^2\theta)}/\hbar=\sqrt{2mE}\sin\theta/\hbar$$

可以利用(1)的结果

$$R_{12}=(k_{1x}-k_{2x})/(k_{1x}+k_{2x}),\qquad T_{12}=1+R_{12}=2k_1/(k_{1x}+k_{2x})$$

但其中

$$k_{1x}=\sqrt{2mE}\cos\theta/\hbar$$
$$k_{2x}=\mathrm{i}k'=\mathrm{i}\sqrt{2mE}\sin\theta/\hbar$$



题图 2.59(c)

于是

$$T_{12}=\frac{2k_{x1}}{k_{x1}+k_{x2}}=\frac{2\cos\theta}{\cos\theta+\mathrm{i}\sin\theta}=2\cos\theta\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta}$$

$$T_{21}=\frac{2k_{x2}}{k_{x1}+k_{x2}}=\frac{2\sin\theta}{\cos\theta+\mathrm{i}\sin\theta}=2\mathrm{i}\sin\theta\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta}$$

$$R_{21}=\frac{k_{2x}-k_{1x}}{k_{1x}+k_{2x}}=\frac{\mathrm{i}\sin\theta-\cos\theta}{\mathrm{i}\sin\theta+\cos\theta}=\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\theta}$$

所以

$$\begin{aligned}T&=T_{12}T_{21}\mathrm{e}^{-\delta}\frac{1}{1-R_{21}^2\mathrm{e}^{-2\delta}}\\&=\frac{4\mathrm{i}\cos\theta\sin\theta\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\theta}\cdot\mathrm{e}^{-k't}}{1-\mathrm{e}^{-4\mathrm{i}\theta}\mathrm{e}^{-2k't}}\\&=\frac{2\mathrm{i}\sin2\theta\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\theta}\mathrm{e}^{-k't}}{1-\mathrm{e}^{-4\mathrm{i}\theta}\mathrm{e}^{-2k't}}\end{aligned}$$

透射率

$$\begin{aligned}|T|^2&=\frac{4\sin^2 2\theta\mathrm{e}^{-2k't}}{(1-\mathrm{e}^{-2k't}\cos4\theta)^2+(\mathrm{e}^{-2k't}\sin4\theta)^2}\\&=\frac{4\sin^2 2\theta\mathrm{e}^{-2k't}}{1+\mathrm{e}^{-4k't}-2\mathrm{e}^{-2k't}\cos4\theta}\\&=\frac{4\sin^2 2\theta}{\mathrm{e}^{2k't}+\mathrm{e}^{-2k't}-2\cos4\theta}\end{aligned}$$

反射率

$$\begin{aligned}1-|T|^2&=1-\frac{4\sin^2 2\theta}{\mathrm{e}^{2k't}+\mathrm{e}^{-2k't}-2\cos4\theta}\\&=\frac{\mathrm{e}^{2k't}+\mathrm{e}^{-2k't}-2}{\mathrm{e}^{2k't}+\mathrm{e}^{-2k't}-2\cos4\theta}\end{aligned}$$

其中

$$k'=\sqrt{2mE}\sin\theta/\hbar$$

2.60 光学(虚)势的吸收系数

题 2.60 求在一维常虚势 $-\mathrm{i}V(V\ll E)$ 下运动的粒子的波函数. 计算概率流并证明虚势代表粒子的吸收. 求吸收系数，用 V 表示.

解

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=\left(\frac{p^2}{2m}-\mathrm{i}V\right)\psi$$

设 $\psi=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$，则有

$$k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}\left(1+\mathrm{i}\frac{V}{E}\right)$$

由于 $V\ll E$，所以

$$k\approx\pm\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\left(1+\mathrm{i}\frac{V}{2E}\right)$$

所以有

$$\psi_\pm(x,t)=\exp\left[\mp\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\frac{V}{2E}x\right]\cdot\exp\left[\pm\mathrm{i}\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x\right]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}$$

式中，ψ_+ 和 ψ_- 分别对应于指数衰减的右行波和左行波，于是概率流为

$$j=\mathrm{Re}\left(\psi^*\frac{p}{m}\psi\right)=\mathrm{Re}\left(\psi^*\frac{\hbar k}{m}\psi\right)\approx\mathrm{Re}\left\{\pm\frac{\hbar}{m}\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\exp\left[\mp\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\cdot\frac{V}{E}x\right]\right\}$$

$$j_\pm=\pm\frac{\hbar}{m}\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\exp\left\{\mp\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\cdot\frac{V}{E}x\right\}$$

这显然是两个分别沿着各自传播方向指数衰减的流. 而吸收系数为

$$\mu=\left|-\frac{1}{j}\cdot\frac{\mathrm{d}j}{\mathrm{d}x}\right|=\left|-\frac{\mathrm{d}\ln j}{\mathrm{d}x}\right|=\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\cdot\frac{1}{E}\right)V$$

由此可见虚势代表吸收.

2.61 Galileo 变换下 Schrödinger 方程的解

题 2.61 令有确定波长 λ 的一维自由粒子含时 Schrödinger 方程的解 $\psi(x,t)$，作为某观察者 o 在坐标为 (x,t) 的参考系中对该粒子的描述. 现在考虑观察者 o' 由坐标 (x',t') 所得的波函数 $\psi'(x',t')$ 所描述的同一粒子. 其中 (x',t') 与 (x,t) 由 Galileo 变换相联系

$$x'=x-vt$$

$$t'=t$$

(1) $\psi(x,t)$，$\psi'(x',t')$ 是否描述同样波长的波？(2) 如果 $\psi(x,t)$ 和 $\psi'(x',t')$ 都满足相应坐标的 Schrödinger 方程，求两者之间的关系.

解 (1) 一维含时 Schrödinger 方程为

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t\psi(x,t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi(x,t)$$

其确定波长的解为

$$\psi_\lambda(x,t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)}$$

其中 $\lambda=2\pi\hbar/p=2\pi/k$，$\omega=\hbar k^2/2m$. 在两个相互运动的参照系中，$p$ 不同，因而波长 λ 也不同.

(2)

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\partial_t\psi'(x',t')&=\mathrm{i}\hbar\partial_t\psi'(x-vt,t)\\&=\mathrm{i}\hbar[\partial_t'\psi'(x',t')-v\partial_x'\psi'(x',t')]\\&=-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x'^2\psi'(x',t')-\mathrm{i}\hbar v\partial_x'\psi'(x',t')\\&=-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi'(x-vt,t)-\mathrm{i}\hbar v\partial_x\psi'(x-vt,t)\end{aligned}$$

所以

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\left[\mathrm{e}^{imvx/\hbar}\mathrm{e}^{-imv^2t/2\hbar}\psi'(x-vt,t)\right]=\mathrm{i}\hbar\partial_t\left[\mathrm{e}^{imvx/\hbar}\mathrm{e}^{-imv^2t/2\hbar}\psi'(x-vt,t)\right]$$

这正是 $\psi(x,t)$ 所满足的 Schrödinger 方程，精确到一个相因子，有

$$\psi(x,t)=\psi'(x-vt,t)\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[mvx-\frac{mv^2}{2}t\right]\right\}$$

2.62　在 p 表象中求解 δ 势垒的透射概率

题 2.62　在动量表象中计算粒子对 δ 势垒 $V(x)=V_0\delta(x)$ 的透射概率 $(E>0)$.

解　动量表象中定态 Schrödinger 方程为

$$\frac{p^2}{2m}\varphi(p)+\int_{-\infty}^{\infty}V_{pp'}\varphi(p')\mathrm{d}p'=E\varphi(p) \tag{1}$$

其中

$$V_{pp'}=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}V_0\delta(x)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p'-p)x}\mathrm{d}x=\frac{V_0}{2\pi\hbar} \tag{2}$$

因为

$$\psi(x)=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\int\varphi(p)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{d}p \tag{3}$$

由式(2)和式(3)，可有

$$\int V_{pp'}\varphi(p)\mathrm{d}p=\frac{V_0}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(p')\mathrm{d}p'=\frac{V_0}{\sqrt{2\pi\hbar}}\psi(0) \tag{4}$$

把式(2)和式(4)代入式(1)得

$$\left(p^2-\hbar^2k^2\right)\varphi(p)+\frac{2mV_0}{\sqrt{2\pi\hbar}}\psi(0)=0 \tag{5}$$

其中 $k=$　$k=\dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$，由 δ 函数的公式

$$(\xi-\xi_0)\delta(\xi-\xi_0)=0$$

可知式(5)的通解为

$$\varphi(p)=c_1\delta(p-\hbar k)+c_2(p+\hbar k)-\frac{2mV_0}{\sqrt{2\pi\hbar}}\cdot\frac{\psi(0)}{p^2-\hbar^2k^2} \tag{6}$$

其中 c_1，c_2，$\psi(0)$为待定常数. 把式(6)代入式(3)，得 x 表象中的波函数

$$\psi(x)=\frac{c_1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+\frac{c_2}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}-\frac{2mV_0}{2\pi\hbar}\psi(0)\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}p}{p^2-\hbar^2k^2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px} \tag{7}$$

式(7)中积分值应该取主值，可由围道积分算出，结果为

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}p}{p^2-\hbar^2k^2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}=\begin{cases}\dfrac{\mathrm{i}\pi}{2\hbar k}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\right), & x>0\\[2ex] \dfrac{\mathrm{i}\pi}{2\hbar k}\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\right), & x<0\end{cases} \tag{8}$$

故由式(7)、式(8)得

$$\psi(0)=\frac{c_1+c_2}{\sqrt{2\pi\hbar}} \tag{9}$$

把式(8)和式(9)代入式(7)得

$$\sqrt{2\pi\hbar}\psi(x)=c_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+c_2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}-\frac{\mathrm{i}mV_0}{2\hbar^2k}(c_1+c_2)\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\right),\qquad x>0$$

因为 $x>0$ 区，不存在 e^{ikx} 项，故 c_1，c_2 存在下列关系

$$c_2=-\mathrm{i}\frac{mV_0}{2\hbar^2k}(c_1+c_2) \tag{10}$$

得

$$\sqrt{2\pi\hbar}\psi(x)=c_1e^{ikx}-\frac{\mathrm{i}mV_0}{2\hbar^2k}(c_1+c_2)e^{ikx}=(c_1+c_2)e^{ikx}$$

从而

$$\psi(x)=\frac{c_1+c_2}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ikx},\qquad x>0$$

同样有

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\left[(c_1-c_2)e^{ikx}+2c_2e^{-ikx}\right],\qquad x<0 \tag{11}$$

把式(11)写为

$$\psi(x)=e^{ikx}+Re^{-ikx}$$

则有 $c_1-c_2=\sqrt{2\pi\hbar}$，可得透射系数为

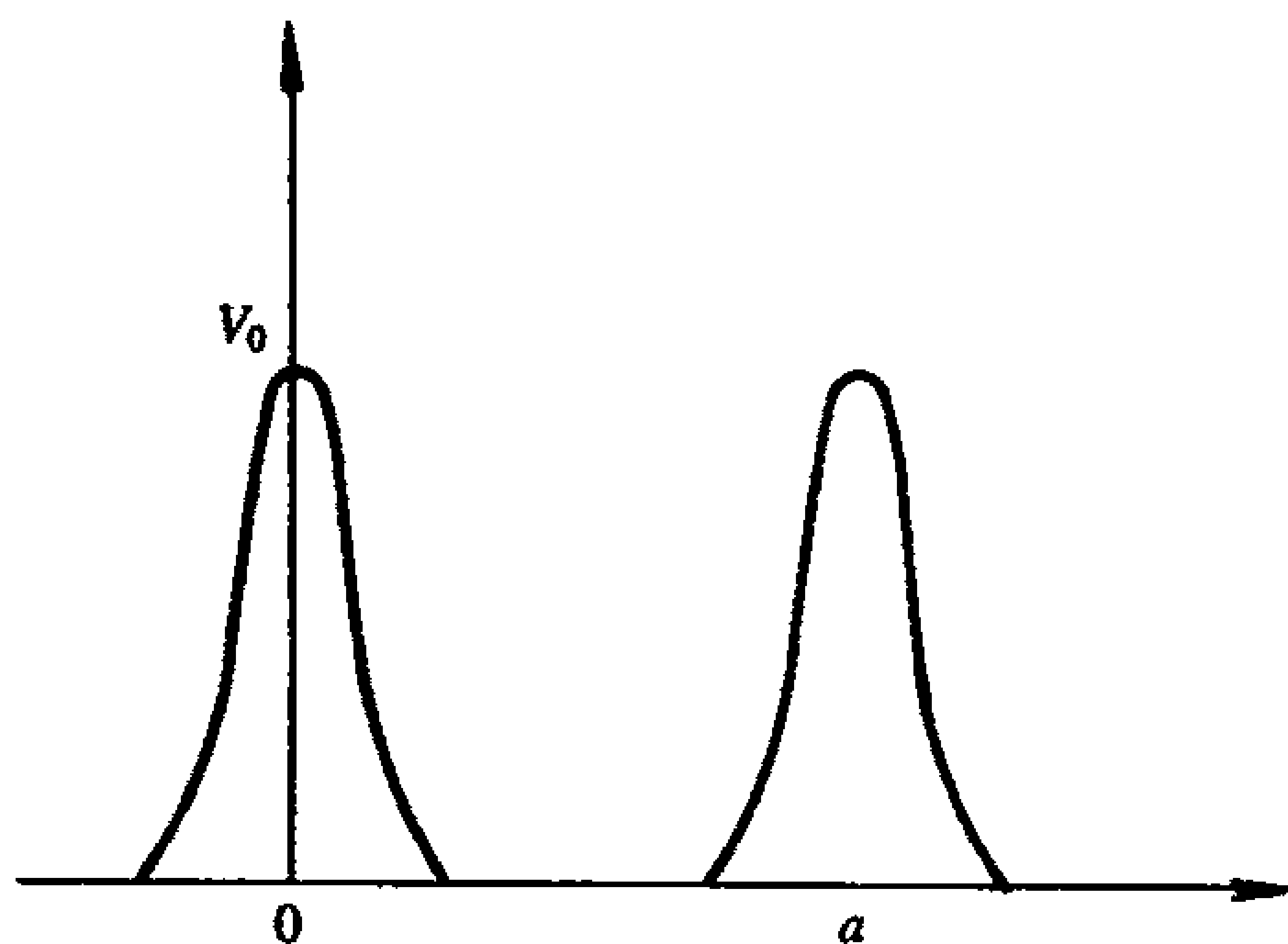
$$\left|\frac{c_1+c_2}{c_1-c_2}\right|^2=\left|1-\frac{2c_2}{c_1+c_2}\right|^{-2}$$

由式(10)得透射系数为

$$\frac{1}{1+\left(\dfrac{mV_0}{\hbar^2k}\right)^2}$$

2.63　在 p 表象中求解双 δ 势垒的反射、透射系数

题 2.63　粒子以能量 $E=\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}$ $(E>0)$ 入射双 δ 势垒 $V(x)=V_0\left[\delta(x)+\delta(x-a)\right]$，求反射系数和透射系数(题图 2.63).



题图 2.63

解　相应的定态 Schrödinger 方程为

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2}{dx^2}+V_0[\delta(x)+\delta(x-a)]\right\}\psi(x)=E\psi(x) \tag{1}$$

在 $x\neq 0$ 与 $x\neq a$ 处，方程(1)改写为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)=E\psi(x)$$

其解为

$$\psi(x)=\begin{cases}e^{ikx}+Re^{-ikx}, & x<0\\ Ae^{ikx}+Be^{-ikx}, & 0<x<a\\ Te^{ikx}, & x>a\end{cases} \tag{2}$$

在 $x=0$ 与 $x=a$ 点，波函数 $\psi(x)$ 的连续条件和一阶导数 $\psi'(x)$ 的不连续性条件为

$$\psi(0^+)=\psi(0^-)$$

$$\psi(a^+)=\psi(a^-)$$

$$\psi'(0^+)-\psi'(0^-)=\frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi(0)$$

$$\psi'(a^+)-\psi'(a^-)=\frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi(a)$$

把式(2)代入以上四式，可得

$$1+R=A+B$$

$$ik(A-B-1+R)=\frac{2mV_0}{\hbar^2}(A+B)$$

$$Ae^{ika}+Be^{-ika}=Te^{ika}$$

$$ik(T-A)e^{ika}+ikBe^{-ika}=\frac{2mV_0}{\hbar^2}e^{ika}$$

以上四式联立求解，可得

$$R=\frac{1-i\dfrac{k\hbar^2}{mV_0}-\left(1+i\dfrac{k\hbar^2}{mV_0}\right)e^{i2ak}}{\left(\dfrac{k\hbar^2}{mV_0}+i\right)^2+e^{i2ak}}$$

$$T=\frac{\dfrac{k^2\hbar^4}{m^2V_0^2}}{\left(\dfrac{k\hbar^2}{mV_0}+i\right)^2+e^{i2ak}}$$

由此可得

$$反射系数=\frac{j_{反}}{j_{入}}=|R|^2=\left|\frac{1-i\dfrac{k\hbar^2}{mV_0}-\left(1+i\dfrac{k\hbar^2}{mV_0}\right)e^{i2ak}}{\left(\dfrac{k\hbar^2}{mV_0}+i\right)^2+e^{i2ka}}\right|^2$$

若记 $\frac{k\hbar^2}{mV_0}=c$，则上式可简写为

$$|R|^2=\left[\frac{(1+\mathrm{i}c)-(1-\mathrm{i}c)\mathrm{e}^{-2ak}}{(c-\mathrm{i})^2+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2ak}}\right]\left[\frac{(1-\mathrm{i}c)-(1+\mathrm{i}c)\mathrm{e}^{\mathrm{i}2ak}}{(c+\mathrm{i})^2+\mathrm{e}^{\mathrm{i}2ak}}\right]$$

同理

$$透射系数=\frac{j_{透}}{j_{入}}=|T|^2=\left|\frac{\frac{k^2\hbar^4}{m^4V_0^2}}{\left(\frac{k\hbar^2}{mV_0}+\mathrm{i}\right)^2+\mathrm{e}^{\mathrm{i}2ak}}\right|^2=\frac{c^4}{\left[(c-i)^2+\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}ka}\right]\left[(c+\mathrm{i})^2+\mathrm{e}^{\mathrm{i}2ak}\right]}$$

$$=\frac{c^4}{c^4+2c^2+2\cos(2ak)(c^2-1)+4c\sin(2ak)+2}$$

显然

$$|R|^2+|T|^2=1$$

即为双 δ 势垒的反射和透射系数.

2.64 Dirac 梳的全反射

题 2.64 质量为 m 的粒子束以动量 $p=\hbar k$ 从 $x=-\infty$ 处入射，受到周期性 δ 势垒

$$V(x)=V_0\sum_{n=0}^{\infty}\delta(x-na),\quad a>0$$

的作用，求能够出现完全反射的动量值.

解 采用动量表象，定态 Schrödinger 方程为

$$\frac{p^2}{2m}\varphi(p)+\int_{-\infty}^{+\infty}V_{pp'}\varphi(p')\mathrm{d}p'=E\varphi(p)=\frac{\hbar^2k^2}{2m}\varphi(p)\tag{1}$$

其中

$$V_{pp'}=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}xV(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'-p)x/\hbar}=\frac{V_0}{2\pi\hbar}\sum_{n=0}^{\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'-p)na/\hbar}$$

$\varphi(p)$ 即 p 表象中的波函数. x 表象中的波函数为

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\varphi(p)\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\tag{2}$$

将 $V_{pp'}$ 代入式(1)，得到

$$(p^2-\hbar^2k^2)\varphi(p)=-\frac{mV_0}{\pi\hbar}\sum_{n=0}^{\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p'\varphi(p')\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'-p)na/\hbar}$$

$$=-\frac{mV_0}{\pi\hbar}\sum_{n=0}^{\infty}\sqrt{2\pi\hbar}\psi(na)\mathrm{e}^{\mathrm{i}pna/\hbar}\tag{3}$$

根据 δ 函数基本公式

$$(\xi-\xi_0)\delta(\xi-\xi_0)=0$$

可知式(3)的通解为

$$\varphi(p)=\sqrt{2\pi\hbar}[A\delta(p-\hbar k)+B\delta(p+\hbar k)]-\frac{2mV_0}{\sqrt{2\pi\hbar}}\sum_n\frac{\psi(na)}{p^2-\hbar^2k^2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}pna/\hbar}$$

代入(2)，即得

$$\psi(x)=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}-\frac{mV_0}{\pi\hbar}\sum_n\psi(na)\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}p}{p^2-\hbar^2k^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(x-na)p/\hbar}\tag{4}$$

其中定积分应取主值，可以用复 p 平面上围道积分法算出，结果为

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}p}{p^2-\hbar^2k^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(x-na)p/\hbar}=\begin{cases}\dfrac{\mathrm{i}\pi}{2\hbar k}[\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x-na)}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(x-na)}], & x>na\\ \dfrac{\mathrm{i}\pi}{2\hbar k}[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(x-na)}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x-na)}], & x<na\end{cases}$$

代入式(4)，并令 $x\to\infty$(即 $x>na$，$n=0,1,2,\cdots$)，即得

$$\psi(x)\xrightarrow{x\to\infty}\left[A-\mathrm{i}\frac{mV_0}{2\hbar^2k}\sum_n\psi(na)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}nak}\right]\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+\left[B+\mathrm{i}\frac{mV_0}{2\hbar^2k}\sum_n\psi(na)\mathrm{e}^{\mathrm{i}nak}\right]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\tag{5}$$

根据题意，入射波 ~ $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$，则在 $x\to\infty$ 处 $\psi(x)$ 应表现为透射波，即

$$\psi(x)\xrightarrow{x\to\infty}D\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$$

式(5)中 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$ 项系数为 0，因此

$$B=-\mathrm{i}\frac{mV_0}{2\hbar^2k}\sum_n\psi(na)\mathrm{e}^{\mathrm{i}nak}$$

类似的，对于 $x<0$ (即 $x<na, n=0,1,2,\cdots$)，式(4)给出

$$\psi(x)=\left[A+\mathrm{i}\frac{mV_0}{2\hbar^2k}\sum_n\psi(na)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}nak}\right]\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+2B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\tag{6}$$

其中第一项为入射波，第二项为反射波.

如果出现完全反射，$x\to\infty$ 出透射波振幅应等于 0，即式(5)中 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$ 项系数为 0，这时

$$A=\mathrm{i}\frac{mV_0}{2\hbar^2k}\sum_n\psi(na)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}nak}$$

在这条件下，式(6)可以写成

$$\psi(x)=2A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+2B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx},\qquad x<0$$

这时，反射概率 $=\left|\dfrac{B}{A}\right|^2=1$，所以 $|B|=|A|$，即

$$\left|\sum_n\psi(na)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kna}\right|=\left|\sum_n\psi(na)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kna}\right|\tag{7}$$

能使式(7)成立的最简单的充分条件是

$$\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ka}=1$$

相应的动量值为

$$p=\hbar k=\frac{\pi\hbar}{a},2\frac{\pi\hbar}{a},3\frac{\pi\hbar}{a},\cdots$$

入射波波长为

$$\lambda=\frac{2\pi}{k}=2a,\frac{1}{2}(2a),\frac{1}{3}(2a),\cdots$$

在这条件下，从相邻两个 δ 势垒上反射回来的波相位相同，从而使总的反射波达到最强；而透射波则逐级减弱，最后衰减为 0.

2.65　受冲力 $p\delta(t)$作用的谐振子基态

题 2.65　一个质量为 m 的粒子处于频率为 ω 的一维谐振子势阱的基态上，受到一冲力 $p\delta(t)$. 求它仍处于基态的概率.

解　设粒子的动量为 P，初始时动量为 p_0，$F = p\delta(t) = \dfrac{dP}{dt}$，则粒子的动量是一个阶跃函数 $P = ph(t) + p_0 = \begin{cases} p_0 + p, & t > 0 \\ p_0, & t < 0 \end{cases}$ 转到动量空间 $\varphi(p_0) \to \varphi(p_0 + p)$.

谐振子基态

$$\psi(x) = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

$$\varphi(p) = \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}} \int \psi(x) e^{-\frac{ipx}{\hbar}} dx = \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}} \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \int e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar} - \frac{ipx}{\hbar}} dx$$

$$= \sqrt[4]{\frac{1}{\pi m\omega\hbar}} e^{-\frac{p^2}{2\hbar m\omega}}$$

初态 $\varphi(p_0)$，末态 $\varphi(p_0 + p)$

$$P = \left|\langle \varphi(p_0) | \varphi(p_0 + p) \rangle\right|^2 = \left| \sqrt{\frac{1}{\pi m\omega\hbar}} \int e^{-\frac{(p_0+p)^2}{2\hbar m\omega} - \frac{p_0^2}{2\hbar m\omega}} dp_0 \right|^2 = e^{-\frac{p^2}{2m\omega\hbar}}$$

2.66　谐振子势场的突变

题 2.66　质量为 m 的粒子处于谐振子势 $V_1(x) = \dfrac{1}{2}Kx^2$, $(K > 0)$ 的基态. (1) 如弹性系数突然增大 1 倍，即势场突然变为 $V_2(x) = Kx^2$, $(K > 0)$，随即测量粒子的能量，求粒子处于 V_2 势场的基态的概率.

(2) 势场由 V_1 突变为 V_2 后，不进行测量，经过一段时间 τ 后，让势场重新恢复成 V_1. 问 τ 取什么值时，粒子正好恢复到原来势场 V_1 的基态(概率 100%)?

解　(1) 初始时谐振子基态波函数

$$\psi_0 = \left(\frac{m\omega_1}{\hbar\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega_1 x^2}{2\hbar}}$$

势场改变后，谐振子的基态波函数

$$\psi_0' = \left(\frac{m\omega_2}{\hbar\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega_2 x^2}{2\hbar}}$$

这里，$K = m\omega_1^2$，$2K = m\omega_2^2$.

势场突变后谐振子的波函数不变，仍为 ψ_0，所以在此波函数中找到 ψ_0' 的概率幅为

$$\langle\psi_0'|\psi_0\rangle = \int\left(\frac{m\omega_1}{\hbar\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega_1 x^2}{2\hbar}}\left(\frac{m\omega_2}{\hbar\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega_2 x^2}{2\hbar}} dx$$

$$= \int\left(\frac{m\omega_1}{\hbar\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega_1 x^2}{2\hbar}}\left(\frac{\sqrt{2}m\omega_1}{\hbar\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{\sqrt{2}m\omega_1 x^2}{2\hbar}} dx$$

$$= \sqrt[8]{2}\left(\frac{m\omega_1}{\hbar\pi}\right)^{1/2}\int e^{-(\sqrt{2}+1)\frac{m\omega_1 x^2}{2\hbar}} dx$$

$$= \frac{\sqrt[8]{2^5}}{\sqrt{\sqrt{2}+1}}$$

所以概率为$|\langle\psi'|\psi_0\rangle|^2 = \dfrac{\sqrt[4]{2^5}}{\sqrt{2}+1} = 0.9852$.

(2) 设$t=0$时刻，Hamilton 量为H，势突变后的 Hamilton 量为H'. ψ_n、ψ_n'分别是H、H'的本征态，相应的本征值为E_n、E_n'

$$E_n = (n+1/2)\hbar\omega_1, \qquad E_n' = (n+1/2)\hbar\omega_2$$

将ψ_0用H'的本征函数族$\{\psi_n'\}$展开

$$\psi_0(x,0) = \sum_n C_n\psi_n'(x,0)$$

随时间的演化

$$\psi_0(x,t) = \sum_n C_n e^{-iE_n't/\hbar}\psi_n'(x,0)$$

设经过τ时间后，粒子又变成$\psi_0(x,0)$，则要求

$$\psi_0(x,\tau) = \psi_0(x,0)$$

$$\sum_n C_n e^{-iE_n'\tau/\hbar}\psi_n'(x,0) = \sum_n C_n\psi_n'(x,0)$$

$$e^{-iE_n'\tau/\hbar} = e^{-i\theta}$$

θ为任意常数相因子.

$$\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar\omega_2\tau}{\hbar} = \theta + 2l'\pi, \qquad l' = 0,1,\cdots$$

$$\theta = \frac{1}{2}\omega_2\tau$$

因为$t=0$时，谐振子的基态为偶宇称态，势场始终保持宇称态，所以，n只能取偶数，取$n=2k$，于是有

$$2k\omega_2\tau = 2l'\pi, \qquad k = 1,2,\cdots$$

为了使此式对每一个k都满足，$\omega_2\tau$必须是π的整数倍，即，$\omega_2\tau = l\pi\ (l=1,2,\cdots)$，所以

$$\tau = l\pi\sqrt{\frac{m}{2K}}$$

2.67　重力场中粒子的能量

题 2.67　对重力场中的任何运动，证明其能量依赖于 m、g 和 h，形式为

$E = Kmg\left(\frac{m^2 g}{h^2}\right)^{\alpha}$，确定 α.

解　重力场中的粒子，Hamilton 量为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + mgx$$

由量纲分析

$$[H] = [E] = \left[\frac{\hbar^2}{mx^2}\right] = [mgx], \qquad [x] = \left[\frac{m^2 g}{h^2}\right]^{-1/3}$$

所以

$$[E] = \left[mg\left(\frac{m^2 g}{h^2}\right)^{-1/3}\right]$$

也就是说必定有

$$E = Kmg\left(\frac{m^2 g}{h^2}\right)^{-1/3}$$

其中 K 是无量纲常数. 即 $\alpha = -\frac{1}{3}$.

2.68　一维 Ising 模型

题 2.68　对一个一维系统电子态，一简单模型的 Hamilton 量为 $H = \sum_{n=1}^{N} E_0 |n\rangle\langle n| + \sum_{n=1}^{N} W\{|n\rangle\langle n+1| + |n+1\rangle\langle n|\}$，其中 $|n\rangle$ 是幺正基，$\langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}$；$E_0$ 和 W 是参数. 假定有周期性边界条件使 $|N+j\rangle \equiv |j\rangle$，计算能级和波函数.

解　体系的正交完备归一基为 $|n\rangle$, $n = 1, 2, \cdots, N$

$$H = \sum_{n=1}^{N} E_0 |n\rangle\langle n| + \sum_{n=1}^{N} W\{|n\rangle\langle n+1| + |n+1\rangle\langle n|\}$$

即

$$H = E_0 + W(A + A^+) \tag{1}$$

式中，$A \equiv \sum_{n=1}^{N} |n\rangle\langle n+1|$, $A^+ \equiv \sum_{n=1}^{N} |n+1\rangle\langle n|$，且有关系式

$$\begin{aligned} &A|n\rangle = |n-1\rangle, \qquad A^+|n\rangle = |n+1\rangle \\ &AA^+ = A^+A = 1 \qquad \text{或} \quad A^+ = A^{-1} \end{aligned} \tag{2}$$

由式(1)和式(2)知道，H, A, A^+ 有共同的本征矢，于是我们仅需去求 A^+ 的本征矢和本征值

$$A_{k'k} = \langle k'|A|k\rangle = \delta_{k',k-1}$$

$$A=\begin{pmatrix}0 & 1 & & & \\ 0 & 0 & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \\ 0 & & & & 1 \\ 1 & 0 & \cdots & & 0\end{pmatrix}_{N\times N}$$

$$A-\lambda I=\begin{pmatrix}-\lambda & 1 & & & \\ 0 & -\lambda & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \\ 0 & & & & 1 \\ 1 & 0 & \cdots & & -\lambda\end{pmatrix}$$

所以

$$\det(A-\lambda I)=(-\lambda)^N+(-1)^{N+1}=(-)^N[\lambda^N-1]=0$$

$$\lambda_i=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_i},\qquad \theta_i=\frac{2\pi}{N}j,\qquad j=0,1,2,\cdots,N-1$$

于是，可认为$|E\rangle$是A, A^+的共同本征态，并记为$|E_i\rangle$

$$A|E_i\rangle=\lambda_i|E_i\rangle,\qquad A^+|E_i\rangle=\frac{1}{\lambda_i}|E_i\rangle$$

$$H|E_i\rangle=\left[E_0+W\left(\lambda_i+\frac{1}{\lambda_i}\right)\right]|E_i\rangle$$
$$=(E_0+2W\cos\theta_i)|E_i\rangle$$

故H的本征值为

$$E_i=E_0+2W\cos\theta_i,\qquad \theta_i=\frac{2\pi}{N}j,\qquad j=0,1,2,\cdots,N-1$$

对应的本征函数可从矩阵方程

$$(A-\lambda_j)|E_j\rangle=0$$

求得

$$|E_j\rangle=\frac{1}{\sqrt{N}}\begin{pmatrix}1\\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_j}\\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}2\theta_j}\\ \vdots\\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}(N-1)\theta_j}\end{pmatrix}$$

或

$$|E_j\rangle=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{n=1}^{N}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(n-1)\theta_j}|n\rangle$$

2.69　关于 Dirac 梳的计算

题 2.69　一个质量为m的粒子在一个无限扩展的周期势中运动. 除了在相隔为a、宽

度为 $b\,(b\ll a)$ 的区间内为 V_0 外，其他地方处处为 0. 这里 V_0 是一个大的正势. 可以把势当作 Dirac δ 函数之和：$V(x)=\sum\limits_{n=-\infty}^{\infty}(V_0b)\delta(x-na)$. 或把间隔当作有限然后取极限从而得以同样的答案. (1) 什么是波函数的适合的边界条件？为什么？设可通过势传播的波的最低能量为 $E_0=\dfrac{\hbar^2k_0^2}{2m}$ (这是 k_0 的定义). (2) 给出一个可解出 k_0 (即 E_0)的超越方程. (3) 给出能量为 E_0 的波函数在 $0\leqslant x<a$ 的形式 (选择归一化和相因子为 $\psi(x=0)=1$). 在 $x=a$ 和 $x=a+b$ 间波函数如何？(4) 证明存在着 E 大于 E_0 的一些范围，其中不存在本征函数. 求第一个这样的能隙开始时的能量精确值.

解 (1) Schrödinger 方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\sum_{n=-\infty}^{\infty}(V_0b)\delta(x-ma)\right]\psi(x)=E\psi(x)$$

对这个方程从 $x=a-\varepsilon$ 到 $x=a+\varepsilon$ 积分. 然后令 $\varepsilon\to0$. 可得

$$\psi'(a^+)-\psi'(a^-)=\frac{2mV_0b}{\hbar^2}\psi(a) \tag{1}$$

加上波函数的连续性条件

$$\psi(a^+)-\psi(a^-)=0 \tag{2}$$

式(1)和式(2)就是波函数适当的边界条件. 可适用于 $x=na,\ n=-\infty,\cdots,-1,0,1,\cdots,+\infty$.

(2) 在 $x\neq na$ 处，Schrödinger 方程的两个基本解为

$$u_1(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx},\qquad u_2=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$$

相应的能量为

$$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$$

令

$$\psi(x)=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx},\qquad 0\leqslant x\leqslant a$$

根据 Bloch 定理，在 $a\leqslant x\leqslant 2a$ 处

$$\psi(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ka}\left[A\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x-a)}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(x-a)}\right]$$

代入式(1)和式(2)

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ka}(A+B)=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}$$

$$\mathrm{i}k\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ka}(A-B)=\mathrm{i}k(A\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}-B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka})+2\Omega(A\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka})$$

式中 $\Omega=\dfrac{mV_0b}{\hbar^2}$ ；A、B 有非零解的充要条件为

$$\begin{vmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ka}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} & \mathrm{e}^{\mathrm{i}Ka}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}\\ \mathrm{i}k\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ka}-(\mathrm{i}k+2\Omega)\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} & -\mathrm{i}k\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ka}+(\mathrm{i}k-2\Omega)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}\end{vmatrix}=0$$

经过计算化简，可得

$$\cos ka+\frac{\Omega}{k}\sin ka=\cos Ka$$

这是确定 Bloch 波数 K 的式子. 而 k 的允许值限制在下列范围中

$$\left|\cos ka + \frac{\Omega}{k}\sin ka\right| \leqslant 1$$

$$\left|\cos[ka - \tan^{-1}\Omega/k]\right| \leqslant \frac{1}{\sqrt{1+\Omega^2/k^2}} \tag{3}$$

满足这个不等式的最小 k 值即为 k_0.

(3) 在 $E = E_0$ 时

$$\psi(x) = Ae^{ik_0x} + Be^{-ik_0x}, \quad 0 \leqslant x \leqslant a$$

由 $\psi(x=0)=1$ 得

$$\psi(x) = 2iA\sin k_0x + e^{-k_0x}, \quad 0 \leqslant x \leqslant a$$

由边界条件可得

$$e^{ika} = 2iA\sin k_0a + e^{-ik_0a}$$

$$2iA = \frac{e^{ika} - e^{-ik_0a}}{\sin k_0a}$$

所以

$$\psi(x) = (e^{ika} - e^{-ik_0a})\frac{\sin k_0x}{\sin k_0a} + e^{-ik_0x}$$

$$\psi(a) = e^{ika} \approx \psi(a+b)$$

$$\psi'(a+b) - \psi'(a) \approx 2\Omega e^{ika}$$

在 $x\in[a,a+b]$时，波函数具有 $e^{\pm k_1x}$ 的形式

$$k_1 = \sqrt{2m(V_0 - E_0)}/\hbar$$

由于 $b \ll a$ ，所以，在此区间中，波函数可视为常数.

(4) 当 $ka = n\pi + \delta$ 时(δ 是一个小正数)

$$\left|\cos[ka - \arctan(\Omega/k)]\right| = \left|\cos[\delta - \arctan(\Omega/k)]\right|$$
$$= \left|\cos\delta\cdot(1+\tan\delta\cdot\Omega/k)/\sqrt{1+\Omega^2/k^2}\right|$$

式(3)要求

$$\left|(1+\tan\delta\cdot\Omega/k)\cos\delta\right| \leqslant 1$$

$$\text{左边} = \left|1 + \frac{\Omega}{k}\delta - \frac{\delta^2}{2} + \cdots\right|$$

当 δ 很小时，左边 $\approx 1 + \frac{\Omega}{k}\delta > 1$. 于是，在 $k > \frac{n\pi}{a}$ 的某一区间中. 不对应着本征函数. 而 $ka = n\pi$ 对应着本征值. 所以，第一个能隙的起点为 $ka = \pi$ ，即 $E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$.

2.70 由算符满足的最低阶方程求本征值

题 2.70 设二维 Hermite 算符 A 满足二次方程 $A^2 - 3A + 2 = 0$ ，且知这是 A 满足的最低阶方程. 问: (1) A 的本征值为何? (2) A 的本征态为何?

解　(1) 由题设知 A 的矩阵是 2×2 的，且本征值是方程 $\lambda^2-3\lambda+2=0$ 的根，所以

$$\lambda_1=1,\qquad \lambda_2=2$$

(2) 在 A 自身表象中，$A=\begin{pmatrix}1&0\\0&2\end{pmatrix}$. 相应于本征值 $\lambda=1,\lambda=2$ 的本征态分别是 $\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$.

2.71　电荷算符与“电荷共轭”算符

题 2.71　如果 $|\psi_q\rangle$ 是电荷算符 Q 的相应于本征值 q 的本征态中的任意一个，即

$$Q|\psi_q\rangle=q|\psi_q\rangle$$

“电荷共轭”算符 c 作用到 $|\psi_q\rangle$ 上使之成为 Q 的、本征值为 $-q$ 的本征态

$$c|\psi_{-q}\rangle=|\psi_{-q}\rangle$$

(1) 求算符 $cQ+Qc$ 的本征值. (2) 一个态可以同时是 c 和 Q 的本征态吗?

解　(1) 设 $|\psi\rangle=\sum\limits_q c_q|\psi_q\rangle$，则

$$(cQ+Qc)|\psi_q\rangle=q|\psi_{-q}\rangle-q|\psi_{-q}\rangle=0$$

所以本征值为 0.

(2) 由于 c 是电荷共轭变换，$cQc^{-1}=-Q$，即 $cQ+Qc=0$，故 c 和 Q 没有共同的本征态(除非 $q=0$，而这是不带电情况，引入 c 也就没有意义了).

2.72　算符本征态的完备性与可观测量 Hermite 性的应用

题 2.72　已知一量子体系，除了能量之外，还包括另外三个可观测量，称为 P，Q，R. 设该体系只有两个(归一化的)能量本征态 $|1\rangle,|2\rangle$，它们未必是 P，Q，R 的本征态. 基于下列各组“实验数据”，尽可能多地定出 P，Q，R 的本征值(注意有一组数据是非物理的，下面设 $\hbar=1$)：(1) $\langle1|P|1\rangle=1/2,\ \langle1|P^2|1\rangle=1/4$. (2) $\langle1|Q|1\rangle=1/2,\ \langle1|Q^2|1\rangle=1/6$. (3) $\langle1|R|1\rangle=1,\ \langle1|R^2|1\rangle=5/4,\ \langle1|R^3|1\rangle=7/4$.

解　(1) 因为 $\langle1|P|1\rangle=1/2$，可设 $P|1\rangle=\frac{1}{2}|1\rangle+\alpha|2\rangle$，由态的正交归一和 P 的 Hermite 性，得 $\langle1|P|2\rangle=\alpha^*$. 于是可设 $P|2\rangle=\alpha^*|1\rangle+\beta|2\rangle$

$$P^2|1\rangle=P\left(\frac{1}{2}|1\rangle+\alpha|2\rangle\right)=\left(\frac{1}{4}+\alpha^*\alpha\right)|1\rangle+\left(\frac{1}{2}\alpha+\alpha\beta\right)|2\rangle$$

由 $\langle1|P^2|1\rangle=1/4$，得 $\alpha^*\alpha=0,\ \alpha=0$. 所以，$P|1\rangle=\frac{1}{2}|1\rangle$，即 $|1\rangle$ 是 P 的本征值为 $\frac{1}{2}$ 的本征态；$|2\rangle$ 也是 P 的本征态，但本征值未知.

(2) 令 $Q|1\rangle=\frac{1}{2}|1\rangle+\gamma|2\rangle$. 同(1)得 $\gamma^*\gamma=(1/6-1/4)<0$，所以这组数据是非物理的.

(3) 设 $R|1\rangle=|1\rangle+\lambda|2\rangle$，由 $\langle1|R^2|1\rangle=5/4$ 可得

$$\lambda^*\lambda=1/4, \qquad \lambda=\frac{1}{2}e^{i\delta}$$

即 $R|1\rangle=|1\rangle+\frac{1}{2}e^{i\delta}|2\rangle$. 因为 $\langle 1|R|2\rangle=\langle 2|R|1\rangle^*=\frac{1}{2}e^{-i\delta}$，可设 $R|2\rangle=\frac{1}{2}e^{-i\delta}|1\rangle+\eta|2\rangle$. 则有

$$R^2|1\rangle=\frac{5}{4}+\frac{1}{2}(1+\eta)e^{i\delta}|2\rangle$$

$$R^3|1\rangle=\frac{5}{4}|1\rangle+\frac{1}{4}(1+\eta)|1\rangle+\frac{5}{8}e^{i\delta}|2\rangle+\frac{1}{2}(1+\eta)\eta e^{i\delta}|2\rangle$$

由 $\langle 1|R^3|1\rangle=7/4$，得 $\eta=1$. 所以在基 $|1\rangle$, $|2\rangle$ 下，R 的矩阵为

$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2}e^{i\delta} \\ \frac{1}{2}e^{-i\delta} & 1 \end{pmatrix}$$

由此可得 R 的本征值为 $\frac{1}{2}$, $\frac{3}{2}$.

2.73 能量表象中的求和规则(1)

题 2.73 利用坐标动量对易关系证明

$$\sum_n (E_n-E_0)|\langle n|x|0\rangle|^2=\text{常数}$$

其中 E_n 是本征态 $|n\rangle$ 的能量. 再求出该常数的值. Hamilton 量为 $H=\frac{p^2}{2m}+V(x)$.

解

$$H=\frac{p^2}{2m}+V(x)$$

$$[H,x]=-\frac{i\hbar p}{m}$$

$$[[H,x],x]=-\frac{\hbar^2}{m}$$

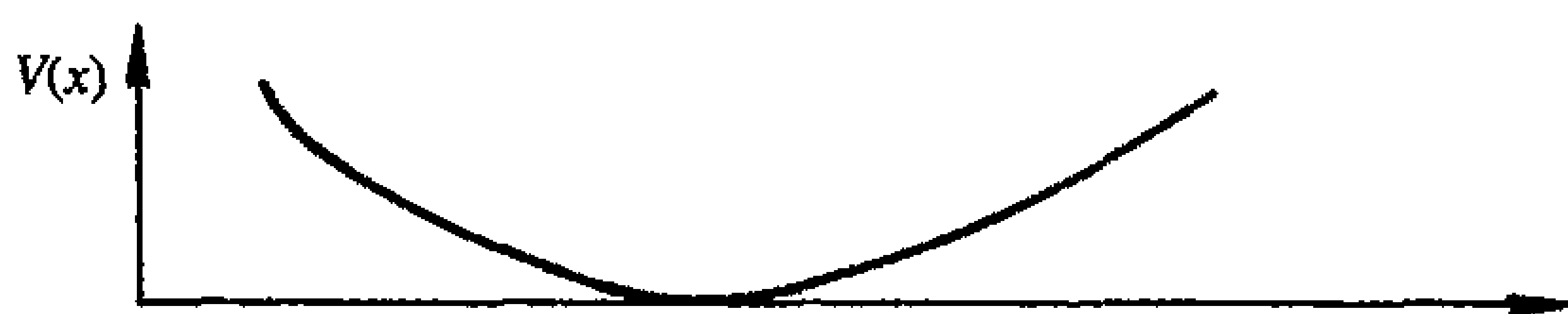
$$\begin{aligned}-\frac{\hbar^2}{m}&=\langle k|[[H,x],x]|k\rangle=\langle k|Hx^2-2xHx+x^2H|k\rangle\\&=2E_k\langle k|x^2|k\rangle-2\langle k|xHx|k\rangle\\&=2E_k\sum_n|\langle k|x|n\rangle|^2-2\sum_n|\langle k|x|n\rangle|^2E_n\\&=2\sum_n(E_k-E_n)|\langle k|x|n\rangle|^2\end{aligned}$$

令 $k=0$，可得

$$\sum_n(E_n-E_0)|\langle n|x|0\rangle|^2=\frac{\hbar^2}{2m}$$

2.74　$V(x)=V_0\left(\frac{a}{x}-\frac{x}{a}\right)^2$

题 2.74　求在势场$V(x)=V_0\left(\frac{a}{x}-\frac{x}{a}\right)^2$ $(a>0)$中运动的粒子的能级与相应的状态波函数，并证明其能谱与谐振子的能谱相同(题图 2.74).



题图 2.74

解　体系的定态 Schrödinger 方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi-\left[E-V_0\left(\frac{a}{x}-\frac{x}{a}\right)^2\right]\psi=0 \tag{1}$$

为了求解这个方程，首先求在$x\to\infty$时的渐进行为，当$x\to\infty$时，方程(1)简化为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi+\frac{V_0}{a^2}x^2\psi=0 \tag{2}$$

引入新的变量$\xi=\frac{\sqrt{2mV_0}}{a\hbar}x^2$，则方程(2)变为

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(\xi)-\frac{1}{4}\psi(\xi)=0$$

其解为$\psi\sim \mathrm{e}^{\pm\xi/2}$，但当$x\to\infty$时，$\mathrm{e}^{\xi/2}\to\infty$舍去，有

$$\psi\xrightarrow{x\to\infty}\mathrm{e}^{-\xi/2} \tag{3}$$

当$x\to\infty$时，方程(1)简化为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi+\frac{V_0a^2}{x^2}\psi=0$$

由变系数的二阶常微分方程的判定方程

$$s(s-1)+sa_{-1}+b_{-2}=0$$

(这里，$a_{-1}=0$, $b_{-2}=-2mV_0a^2/\hbar^2$)，解得

$$s=\frac{1}{2}\left[1\pm\left(1+\frac{8mV_0a^2}{\hbar^2}\right)^{1/2}\right]$$

于是

$$\psi\xrightarrow{x\to 0}x^{\frac{1}{2}\left[1\pm\left(1+8mV_0a^2/\hbar^2\right)^{1/2}\right]}u(x)$$

其中$u(x)$可在$x=0$处展开成x的幂级数. 但当$x\to 0$时

$$\psi(x)\sim x^{\frac{1}{2}\left[1-\left(1+8mV_0a^2/\hbar^2\right)^{1/2}\right]}u(x)\to\infty$$

不满足波函数的有限性，故只取

$$\psi(x)\sim x^{\frac{1}{2}\left[1+\left(1+8mV_0a^2/\hbar^2\right)^{1/2}\right]}u(x)$$

令 $\frac{1}{2}\left[1-\left(1+\frac{8mV_0a^2}{\hbar^2}\right)^{1/2}\right]=n$ ，并将变量 x 换为 ξ，则上式改写为

$$\psi(\xi)\xrightarrow{\xi\to 0}\xi^{\frac{n}{2}}u(\xi) \tag{4}$$

综合(3)和式(4)时，可令方程(1)的解为

$$\psi=\mathrm{e}^{-\frac{\xi}{2}}\xi^{\frac{n}{2}}u(\xi) \tag{5}$$

把式(5)代入式(1)，得 $u(\xi)$所满足的方程为

$$\xi u''+\left(n+\frac{1}{2}-\xi\right)u'-\left[\frac{n}{2}+\frac{1}{4}-\frac{ma(E+2V_0)}{2\hbar\sqrt{2mV_0}}\right]u=0 \tag{6}$$

知仅当

$$\beta=\frac{n}{2}+\frac{1}{4}-\frac{ma(E+2V_0)}{2\hbar\sqrt{2mV_0}}=-k,\qquad k=0,1,2,\cdots$$

时，方程(6)才具有物理意义的解. 由此可得方程(1)的能量本征值为

$$\begin{aligned}E&=\frac{2\hbar\sqrt{2mV_0}}{ma}\left[k+\frac{1}{4}+\frac{n}{2}\right]-2V_0\\&=\frac{2\hbar\sqrt{2mV_0}}{ma}\left[k+\frac{1}{4}+\frac{1}{4}\left(1+\sqrt{1+\frac{8mV_0a^2}{\hbar^2}}\right)\right]-2V_0\\&=\frac{2\hbar\sqrt{2V_0/m}}{a}\left[k+\frac{1}{2}+\frac{1}{4}\left(\sqrt{1+\frac{8mV_0a^2}{\hbar^2}}-\sqrt{\frac{8mV_0a^2}{\hbar^2}}\right)\right]\end{aligned} \tag{7}$$

若令 $\omega=\frac{2}{a}\sqrt{\frac{2V_0}{m}}$ ，则式(7)可简写为

$$E_k=\hbar\omega\left[k+\frac{1}{2}+\frac{1}{4}\left(\sqrt{1+\frac{8mV_0a^2}{\hbar^2}}-\sqrt{\frac{8mV_0a^2}{\hbar^2}}\right)\right],\qquad k=0,1,2,\cdots \tag{8}$$

式(8)即为粒子的定态能级，显然与频率为 $\omega=\frac{2}{a}\sqrt{\frac{2V_0}{m}}$ 的线性谐振子的能谱相同，只是零点能相应的大了 $\frac{1}{4}\left(\sqrt{1+\frac{8mV_0a^2}{\hbar^2}}-\sqrt{\frac{8mV_0a^2}{\hbar^2}}\right)$. 与式(8)相应的定态波函数是

$$\psi_k(x)=c_kx^n\exp\left[-\left(\frac{mV_0}{2a^2\hbar^2}\right)^{1/2}x^2\right]F\left(-k,n+\frac{1}{2},\sqrt{\frac{2mV_0}{a^2\hbar^2}}x^2\right)$$

式中，$n=\frac{1}{2}\left(1+\sqrt{1+\frac{8mV_0a^2}{\hbar^2}}\right)$，$k=0,1,2,\cdots$，$c_k$为归一化常数.

2.75　氨分子钟工作原理

题 2.75　氨分子钟的工作原理.

解　氨分子钟作为时间标准和频率标准而受到人们的青睐，其工作可简单解释原理如下：

氮原子(N)是 5 价的，其电子组态为 $1s^22s^22p^3$. 在 2p 轨道上的 3 个电子与 3 个氢原子具有三角锥的几何构型. 氮原子 N 在 3 个氢原子组成的平面两侧来回振动，其势能函数类似于双δ势阱. 氢原子平面两边的两个平衡位置对应于两个势谷，氮原子 N 靠隧道效应穿过氢原子平面形成的势垒. 可用双δ势阱的简化模型来模拟. 通过求解相应的定态 Schrödinger 方程，可得氮原子的定态波函数.

设 $0<E<V_0$

$$\psi(x)=\begin{cases}0, & x<-a\\ A\sin k_1(x+a), & -a<x<-b\\ B\cosh k_2x, & -b<x<b\\ C\sin k_1(x-a), & b<x<a\\ 0, & x>a\end{cases}\tag{1}$$

式中：$k_1^2=\dfrac{2mE}{\hbar^2}>0$，$k_2^2=\dfrac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)>0$，并利用了边界条件$\psi(\pm a)=0$. 再根据波函数$\psi(x)$在$\pm b$点的连续条件，可得氮原子能量$E$满足的超越方程为

$$k_1\cot k_1(b-a)=-k_2\tanh(k_2b)$$

为了进一步得出氮原子的振荡频率和能级的关系，将双方势阱作如下近似处理

$$V_0\to\infty,\qquad b\to 0,\qquad b/a\ll 1$$

于是双方势阱中的小方势阱等价为δ势垒，使得$\psi(x)$在$\pm b$点的连续条件简化为

$$\begin{cases}A\sin k_1(b+a)=C\sin k_1(b-a)\\ A\sin k_1(-b+a)=C\sin k_1(-b-a)\end{cases}$$

得

$$k_1(b+a)=k_1(b-a)+n\pi,\qquad n=1,2,3,\cdots$$

$$k_1=\frac{n\pi}{2a},\qquad E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2},\qquad n=1,2,3,\cdots$$

当$n=1$时，$k_1=\dfrac{\pi}{2a}$，由式(1)可得

$$\psi_1(x)=\begin{cases}0, & x<-a\\ A\sin k_1(x+a)=A\cos k_1x, & -a<x<-b\\ 0, & -b<x<b\\ C\sin k_1(x-a)=-C\cos k_1x, & b<x<a\\ 0, & x>a\end{cases}$$

显然，$\psi_1(x)$具有偶字称.

当 $n=2$ 时，$k_1=\frac{\pi}{a}$，得

$$\psi_2(x)=\begin{cases}0, & x<-a\\ A\sin k_1(x+a)=-A\sin k_1x, & -a<x<-b\\ 0, & -b<x<b\\ C\sin k_1(x-a)=-A\sin k_1x, & b<x<a\\ 0, & x>a\end{cases}$$

显然，$\psi_2(x)$ 具有奇宇称.

若在初始时刻 $t=0$，外界有一个微小的激发，使氮原子处于由 $\psi_1(x)$ 和 $\psi_2(x)$ 的叠加态之中

$$\phi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(x)+\psi_2(x)]$$

由于 $\psi_1(x)$ 和 $\psi_2(x)$ 的宇称相反，使得 $\phi(x,0)$ 只在一个阱内有非零值，而在另一个阱内的值为零. 表明在 $t=0$ 时刻，氮原子只在一个阱内，而在 $t>0$ 时刻，氮原子开始在两个阱内来回振荡，振荡频率由 t 时刻的波函数 $\phi(x,t)$ 决定

$$\phi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_1(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_1t}+\psi_2(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_2t}\right]$$
$$=\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\left[\psi_1(x)+\psi_2(x)e^{-\frac{i}{\hbar}(E_2-E_1)t}\right]$$

t 时刻，在阱内找到粒子的概率为

$$|\phi(x,t)|^2=\frac{1}{2}\left[|\psi_1|^2+|\psi_2|^2+\psi_1^*\psi_2e^{-\frac{i}{\hbar}(E_2-E_1)t}+\psi_1\psi_2^*e^{\frac{i}{\hbar}(E_2-E_1)t}\right]$$
$$=\frac{1}{2}\left[|\psi_1|^2+|\psi_2|^2+2\psi_1\psi_2\cos\left(\frac{E_2-E_1}{\hbar}t\right)\right]\tag{2}$$

式(2)表明，粒子概率密度 $|\phi(x,t)|^2$ 的最大值在两势阱间振荡，即氮原子来回穿透势垒. 若振荡周期用 τ 表示，则

$$\frac{E_2-E_1}{\hbar}\tau=2\pi,\qquad \tau=\frac{2\pi\hbar}{E_2-E_1}$$

振荡频率 ν 为

$$\nu=\frac{1}{\tau}=\frac{E_2-E_1}{2\pi\hbar}$$

由于 E_1，E_2 是量子化的，$2\pi\hbar$ 是常数，故 ν 是最稳定的，不会受空气阻力、黏滞性及温度等因素的影响.

2.76　能量表象中的求和规则(2)

题 2.76　粒子做一维运动，$H=\frac{p^2}{2\mu}+V(x)$，定态波函数为 $|n\rangle$

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle, \qquad n = 1,2,3,\cdots$$

(1) 证明

$$\langle n|p|m\rangle = a_{nm}\langle n|x|m\rangle \tag{1}$$

并求系数 a_{nm}. (2) 利用式(1)推导求和公式

$$\sum_n (E_n - E_m)^2 \left|\langle n|x|m\rangle\right|^2 = \frac{\hbar^2}{\mu^2}\langle m|p^2|m\rangle \tag{2}$$

(3) 证明

$$\sum_n (E_n - E_m)\left|\langle n|x|m\rangle\right|^2 = \frac{\hbar^2}{\mu^2}$$

解 (1) 可以证明

$$p = \frac{\mu}{\mathrm{i}\hbar}[x,H] \tag{3}$$

$$\frac{\mu}{\mathrm{i}\hbar}[x,H] = \frac{\mu}{\mathrm{i}\hbar}\left[x, \frac{p^2}{2\mu} + V(x)\right] = \frac{\mu}{\mathrm{i}\hbar}\left[x, \frac{p^2}{2\mu}\right] = p$$

利用式(3)

$$\langle n|p|m\rangle = \langle n|\frac{\mu}{\mathrm{i}\hbar}[x,H]|m\rangle = \frac{\mu}{\mathrm{i}\hbar}\langle n|xH - Hx|m\rangle = \frac{\mu}{\mathrm{i}\hbar}(E_n - E_m)\langle n|x|m\rangle \tag{4}$$

$$a_{mn} = \frac{\mathrm{i}\mu}{\hbar}(E_n - E_m)$$

式(4)可以表示为

$$(E_n - E_m)\langle n|x|m\rangle = -\frac{\mu}{\mathrm{i}\hbar}\langle n|p|m\rangle \tag{5}$$

利用式(5)

$$\begin{aligned}
&\sum_n (E_n - E_m)\left|\langle n|x|m\rangle\right|^2 \\
&= -\sum_n (E_m - E_n)\langle m|x|n\rangle(E_n - E_m)\langle n|x|m\rangle \\
&= -\left(-\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu}\right)^2 \sum_n \langle m|p|n\rangle\langle n|p|m\rangle \\
&= \frac{\hbar^2}{\mu^2}\langle m|p\sum_n|n\rangle\langle n|p|m\rangle \\
&= \frac{\hbar^2}{\mu}\langle m|p^2|m\rangle
\end{aligned}$$

式(2)得证. 以上利用了完备公式

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$$

$$\begin{aligned}
&\sum_n (E_n - E_m)\left|\langle n|x|m\rangle\right|^2 \\
&= \sum_n (E_n - E_m)\langle m|x|n\rangle\langle n|x|m\rangle
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&=\frac{1}{2}\sum_n\left[\langle m|xH|n\rangle\langle n|x|m\rangle+\langle m|x|n\rangle\langle n|Hx|m\rangle\right.\\
&\quad\left.-\langle m|Hx|n\rangle\langle n|x|m\rangle-\langle m|x|n\rangle\langle n|xH|m\rangle\right]\\
&=\frac{1}{2}\left[\langle m|xH\sum_n|n\rangle\langle n|x|m\rangle+\langle m|x\sum_n|n\rangle\langle n|Hx|m\rangle\right.\\
&\quad\left.-\langle m|Hx\sum_n|n\rangle\langle n|x|m\rangle-\langle m|x\sum_n|n\rangle\langle n|xH|m\rangle\right]\\
&=\frac{1}{2}\langle m|xHx+xHx-Hxx-xxH|m\rangle\\
&=\frac{1}{2}\langle m|x[H,x]+[x,H]x|m\rangle
\end{aligned}
$$

由

$$
[x,H]=-[H,x]=\frac{i\hbar}{\mu}p
$$

因此

$$
\sum_n(E_n-E_m)\left|\langle n|x|m\rangle\right|^2=-\frac{i\hbar}{2\mu}\langle m|xp-px|m\rangle=\frac{\hbar^2}{2\mu}.
$$

得证.

2.77 能量表象中的求和规则(3)

题 2.77 对于一维粒子，$H=p^2/2\mu+V(x)$，证明求和规则

$$
\sum_n(E_n-E_k)^2|x_{nk}|^2=-2\hbar^2\frac{\partial E_k}{\partial\mu}
$$

证明 由 Hellmann-Feynman 定理，有

$$
\left\langle\frac{\partial H}{\partial\lambda_k}\right\rangle=\frac{dE}{d\lambda_k}
$$

$$
\begin{aligned}
\sum_n(E_n-E_k)^2|x_{nk}|^2&=\sum_n\langle k|xH-Hx|n\rangle\langle n|Hx-xH|k\rangle\\
&=-\langle k|(Hx-xH)^2|k\rangle=-\langle k|\left[\frac{p^2}{2\mu},x\right]|k\rangle\\
&=2\hbar^2\langle k|\frac{p^2}{2\mu^2}|k\rangle=-2\hbar^2\langle k|\frac{\partial H}{\partial\mu}|k\rangle=-2\hbar^2\frac{\partial E_k}{\partial\mu}
\end{aligned}
$$

2.78 力学量的时间导数在能量表象的矩阵元

题 2.78 设体系能量本征态记为$|n\rangle$，$H|n\rangle=E_n|n\rangle$. 力学量 A 在能量表象中矩阵元记为 $A_{kn}=\langle k|A|n\rangle$，证明

$$\left(\frac{dA}{dt}\right)_{kn}=i\omega_{kn}A_{kn}$$

其中 $\omega_{kn}=(E_n-E_k)/\hbar$.

证明

$$\left(\frac{dA}{dt}\right)_{kn}=\langle k|\frac{dA}{dt}|n\rangle=\frac{1}{i\hbar}\langle k|[A,H]|n\rangle$$
$$=-\frac{1}{i\hbar}\langle k|HA|n\rangle+\frac{1}{i\hbar}\langle k|AH|n\rangle$$
$$=i\frac{E_k}{\hbar}\langle k|A|n\rangle-i\frac{E_n}{\hbar}\langle k|A|n\rangle$$
$$=i\omega_{kn}A_{kn}$$

2.79 在动量表象中求解均匀力场中运动粒子的定态波函数

题 2.79 质量为 μ 的粒子在均匀力场 $f(x)=-F(F>0)$ 中运动，运动范围限制在 $x\geqslant 0$. 试给出动量表象中的定态方程并求出定态波函数 $\varphi(p)$.

解 由作用力 $f(x)=-F=-\nabla V$ 得势能 $V=Fx$. 定态方程为

$$\left(\frac{p^2}{2\mu}+Fx\right)\varphi(p)=E(p)$$

或

$$\left(\frac{p^2}{2\mu}+i\hbar F\frac{d}{dp}\right)\varphi(p)=E\varphi(p)$$

其解为

$$\varphi(p)=A\exp\left[\frac{i}{\hbar F}\left(\frac{p^3}{6\mu}-Ep\right)\right]$$

2.80 在均匀力场中运动粒子 $\frac{\partial\rho}{\partial t}$ 与 $\frac{\partial\rho}{\partial p}$ 的关系

题 2.80 质量为μ的粒子在均匀力场 $f(x)=-F(F>0)$ 中运动，$\rho(p,t)$ 为其在动量空间中的概率密度，求 $\frac{\partial\rho}{\partial t}$ 与 $\frac{\partial\rho}{\partial p}$ 的关系.

解 在动量表象中，粒子的势能

$$V=Fx=-i\hbar F\frac{\partial}{\partial p}$$

波函数 $\varphi(p,t)$ 满足方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(p,t)=\left(\frac{p^2}{2\mu}+i\hbar F\frac{\partial}{\partial p}\right)\varphi(p,t) \tag{1}$$

方程(1)的 Hermite 共轭为

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi^*(p,t)=\left(\frac{p^2}{2\mu}-\mathrm{i}\hbar F\frac{\partial}{\partial p}\right)\varphi^*(p,t) \tag{2}$$

$\varphi^*(p,t)\times$式(1)$-\varphi(p,t)\times$式(2)得

$$\frac{\partial}{\partial t}|\varphi(p,t)|^2=F\frac{\partial}{\partial p}|\varphi(p,t)|^2$$

即

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(p,t)=F\frac{\partial\rho(p,t)}{\partial p},\qquad \rho(p,t)=|\varphi(p,t)|^2$$

2.81 中子与反中子互相转变

题 2.81 中子n和反中子$\bar{n}$的质量都是m，它们的态$|n\rangle$和$|\bar{n}\rangle$可以看成是一个自由Hamilton量H_0的简并态

$$H_0|n\rangle=mc^2|n\rangle,\qquad H_0|\bar{n}\rangle=mc^2|\bar{n}\rangle$$

设有某种相互作用H'能使中子和反中子互相转变

$$H'|n\rangle=\alpha|\bar{n}\rangle,\qquad H'|\bar{n}\rangle=\alpha|n\rangle$$

其中$\alpha=\alpha^*$，试求$t=0$时刻的一个中子在t时刻变成反中子的概率.

解 取H_0表象，基矢为$|1\rangle=|n\rangle,|2\rangle=|\bar{n}\rangle$. 体系 Hamilton 量$H=H_0+H'$在$H_0$表象的矩阵元

$$H_{11}=\langle 1|H_0+H'|1\rangle=\langle n|H_0+H'|n\rangle=mc^2$$
$$H_{12}=\langle 1|H_0+H'|2\rangle=\langle n|H_0+H'|\bar{n}\rangle=\alpha$$
$$H_{21}=H_{12}^*=\alpha$$
$$H_{22}=\langle 2|H_0+H'|2\rangle=\langle \bar{n}|H_0+H'|\bar{n}\rangle=mc^2$$

定态方程为

$$H|\psi\rangle=E|\psi\rangle$$

或

$$\begin{pmatrix} mc^2 & \alpha \\ \alpha & mc^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}=E\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

解之得

$$E_1=mc^2+\alpha,\qquad |\psi_1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}(|n\rangle+\langle\bar{n}|)$$

$$E_2=mc^2-\alpha,\qquad |\psi_2\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}(|n\rangle-\langle\bar{n}|)$$

$$|\psi(t)\rangle=A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_1t/\hbar}|\psi_1\rangle+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_2t/\hbar}|\psi_2\rangle$$

$$|\psi(0)\rangle=A|\psi_1\rangle+B|\psi_2\rangle=\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$A=\langle\psi_1|\psi(0)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(1,\ 1)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$B=\langle\psi_2|\psi(0)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(1,\ -1)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$|\psi(t)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-iE_1t/\hbar}|\psi_1\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-iE_2t/\hbar}|\psi_2\rangle$$

$$=\frac{1}{2}e^{-imc^2t/\hbar}\left\{e^{-i\alpha t/\hbar}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}+e^{i\alpha t/\hbar}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}\right\}=e^{-imc^2t/\hbar}\begin{bmatrix}\cos\frac{\alpha t}{\hbar}\\-i\sin\frac{\alpha t}{\hbar}\end{bmatrix}$$

$$=e^{-imc^2t/\hbar}\left\{\cos\frac{\alpha t}{\hbar}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}-i\sin\frac{\alpha t}{\hbar}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\right\}$$

$$=e^{-imc^2t/\hbar}\left\{\cos\frac{\alpha t}{\hbar}(n)-i\sin\frac{\alpha t}{\hbar}(\bar{n})\right\}$$

t 时刻 $n\to\bar{n}$ 的概率为 $\sin^2\dfrac{\alpha t}{\hbar}$.

2.82　表象与表象变换例(1)

题 2.82　有一量子体系，其态矢空间三维. 选择基矢 $\{|1\rangle,|2\rangle,|3\rangle\}$. 体系的 Hamilton 量 H 及另两个力学量 A 与 B 为

$$H=\hbar\omega_0\begin{pmatrix}1&0&0\\0&2&0\\0&0&2\end{pmatrix},\qquad A=a\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix},\qquad B=b\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}$$

设 $t=0$ 时体系的态矢为

$$|\psi(0)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle+\frac{1}{2}|2\rangle+\frac{1}{2}|3\rangle$$

(1) 在 $t=0$ 时测量体系能量 H 可得哪些结果？相应概率多大？计算 H 平均值 $\overline{H}$ 及 $\Delta H=\sqrt{\overline{H^2}-(\overline{H})^2}$. (2) 如在 $t=0$ 时测量 A，可能值及相应概率为多大？写出测量后体系的态矢量. (3) 计算任意 t 时刻 A 与 B 的平均值 $\overline{A(t)}$ 与 $\overline{B(t)}$.

解　(1) 能量的可能值为 $E_1=\hbar\omega_0$，$E_2=E_3=2\hbar\omega_0$，相应概率为 1/2 与 1/2.

$$\overline{H}=\frac{3}{2}\hbar\omega_0,\qquad \overline{H^2}=\frac{5}{2}\hbar^2\omega_0^2,\qquad \Delta H=\sqrt{\overline{H^2}-(\overline{H})^2}=\frac{1}{2}\hbar\omega_0$$

(2) 由 A 的本征方程

$$a\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\c_2\\c_3\end{pmatrix}=A_i\begin{pmatrix}c_1\\c_2\\c_3\end{pmatrix}$$

解得

$$A_1=-a,\quad |\varphi_1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\1\\-1\end{pmatrix},\quad A_2=a,\quad |\varphi_2\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}$$
$$A_3=a,\quad |\varphi_3\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\1\\1\end{pmatrix} \tag{1}$$

由于$A_2=A_3=a$，相应的简并态有无限多个，只要$c_2=c_3$，c_1取任意值，并满足归一化条件$|c_1|^2+|c_2|^2+|c_3|^2=1$的$|\varphi\rangle$，均为$A$的本征值$a$对应的本征态. 式(1)中给出的$|\varphi_2\rangle$与$|\varphi_3\rangle$是最简单的一组本征态矢(选择$c_1=1$与0). 已知$t=0$时体系的态矢为

$$|\psi(0)\rangle=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}\sqrt{2}\\1\\1\end{pmatrix}$$

测量A取值$-a$的概率为

$$|\langle\varphi_1|\psi(0)\rangle|^2=\left|\frac{1}{\sqrt{2}}(0,1,-1)\frac{1}{2}\begin{pmatrix}\sqrt{2}\\1\\1\end{pmatrix}\right|^2=0$$

故$t=0$时测量A的唯一的a值. 测量A后，体系的态矢为$|\varphi_2\rangle$或$|\varphi_3\rangle$或它们的线性组合.

(3) 任意t时体系的态矢为

$$|\psi(t)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-iE_1t/\hbar}|1\rangle+\frac{1}{2}e^{-iE_2t/\hbar}|2\rangle+\frac{1}{3}e^{-iE_3t/\hbar}|3\rangle=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}\sqrt{2}e^{-i\omega_0t}\\e^{-i2\omega_0t}\\e^{-i2\omega_0t}\end{pmatrix}$$

于是

$$\overline{A(t)}=\langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle=\frac{a}{4}\left(\sqrt{2}e^{i\omega_0t},e^{i2\omega_0t},e^{i2\omega_0t}\right)\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\sqrt{2}e^{-i\omega_0t}\\e^{-i2\omega_0t}\\e^{-i2\omega_0t}\end{pmatrix}=a$$

$$\overline{B(t)}=\langle\psi(t)|B|\psi(t)\rangle=\frac{b}{4}\left(\sqrt{2}e^{i\omega_0t},e^{i2\omega_0t},e^{i2\omega_0t}\right)\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\sqrt{2}e^{-i\omega_0t}\\e^{-i2\omega_0t}\\e^{-i2\omega_0t}\end{pmatrix}$$
$$=\frac{b}{4}\left(2\sqrt{2}\cos\omega_0t+1\right)$$

平均值$\overline{A(t)}$不随t变化是因为力学量A同Hamilton量H对易，A为守恒量.

2.83　表象与表象变换例(2)

题 2.83　Hermite 算符A与B满足$A^2=B^2=1$，$AB+BA=0$，A,B均无简并，求：(1)

在 A 表象中 A 与 B 的矩阵表示式，并求 B 的本征函数表示式；(2) 在 B 表象中 A 与 B 的矩阵表示式，并求 A 的本征函数表示式；(3) A 表象到 B 表象的幺正变换矩阵 S.

解　(1) 因为 $A^2=B^2=1$，算符 A, B 的本征值为 $1, -1$，在 A 表象中，A 的矩阵表示式为对角阵，对角元为其本征值 $A=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$，设 B 的矩阵表示式为 $\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}$

$$AB+BA=\begin{pmatrix}2a & 0\\ 0 & -2d\end{pmatrix}=0$$

$$a=0,\qquad d=0$$

$$B^2=\begin{pmatrix}0 & b\\ c & 0\end{pmatrix}^2=\begin{pmatrix}bc & 0\\ 0 & bc\end{pmatrix}=1$$

又因为 $B^\dagger=B$，故有 $b^*=c$，于是，有

$$b=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta},\qquad c=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta}$$

$$B=\begin{pmatrix}0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta} & 0\end{pmatrix}$$

B 的本征函数 $\dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta}\end{pmatrix}$，相应的本征值为 1；$\dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta}\end{pmatrix}$，相应的本征值为−1.

(2) 同上题，只需将 A 与 B 的地位交换一下即可.

(3) 令 $S=\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}$，为 A 表象到 B 表象的正交变换矩阵，则有

$$S\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}S^{-1}=\begin{pmatrix}0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta} & 0\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}a & -b\\ c & -d\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}c\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta} & d\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\\ a\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta} & b\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta}\end{pmatrix}$$

解得 $a=1, b=1, c=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta}, d=-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta}$. 因为 S 是幺正矩阵，$S^\dagger=S$，最后得到

$$S=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta} & -\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta}\end{pmatrix}$$

2.84　由不确定性关系求最小不确定性态

题 2.84　设 $\delta x=\sqrt{\overline{(x-\bar{x})^2}}, \delta p_x=\sqrt{\overline{(p_x-\bar{p}_x)^2}}$，且 $\psi(x)$ 中 $\bar{x}=\bar{p}_x=0$. 试求 $\delta x\delta p_x$ 的最小可能值，并写出最小不确定性态的波函数.

解　考虑下列不等式

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\alpha x\psi+\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right|^2\mathrm{d}x\geqslant 0 \tag{1}$$

由于被积函数是绝对值，显然不等式成立，其中α是任意实常数. 上式右边可写为

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\alpha x\psi+\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right)\left(\alpha x\psi^*+\frac{\mathrm{d}\psi^*}{\mathrm{d}x}\right)\mathrm{d}x$$

上式经展开后可分为三项，分别为

$$\alpha^2\int_{-\infty}^{+\infty}x^2|\psi|^2\,\mathrm{d}x=\alpha^2(\delta x)^2 \tag{2}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\alpha x\frac{\mathrm{d}\psi^*}{\mathrm{d}x}\psi+\alpha x\psi^*\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right)\mathrm{d}x=\alpha\int_{-\infty}^{+\infty}x\frac{\mathrm{d}|\psi|^2}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x=-\alpha\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi|^2\,\mathrm{d}x=-\alpha \tag{3}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}\psi^*}{\mathrm{d}x}\cdot\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x=-\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}\mathrm{d}x=\frac{1}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\hat{p}_x^2\psi\mathrm{d}x=\frac{1}{\hbar^2}(\delta p_x)^2 \tag{4}$$

将式(2)、式(3)、式(4)代入式(1)可得

$$\alpha^2(\delta x)^2-\alpha+\frac{1}{\hbar^2}(\delta p_x)^2\geqslant 0$$

如果这个关于α的一元二次方程对所有的α而言都是正的，则它的判别式必为负，从而给出下列不等式

$$\delta x\delta p_x\geqslant\frac{1}{2}\hbar \tag{5}$$

由式(5)可知，$\delta x\delta p_x$最小可能值为$\frac{1}{2}\hbar$，此时波包称最小不确定性波包，最小不确定性波包波函数呈下列形式

$$\psi=\frac{1}{(2\pi)^{1/4}\sqrt{\delta x}}\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_0x-\frac{x^2}{4(\delta x)^2}\right]$$

其中p_0和δx都是常数，这个态的坐标概率密度为

$$|\psi|^2=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\delta x}\exp\left[-\frac{x^2}{2(\delta x)^2}\right]$$

这是一个 Gauss 分布，坐标标准偏差为δx. 动量表象中的波函数是

$$\psi(p_x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_xx}\mathrm{d}x=A\exp\left[-\frac{(\delta x)^2(p_x-p_0)^2}{\hbar^2}\right]$$

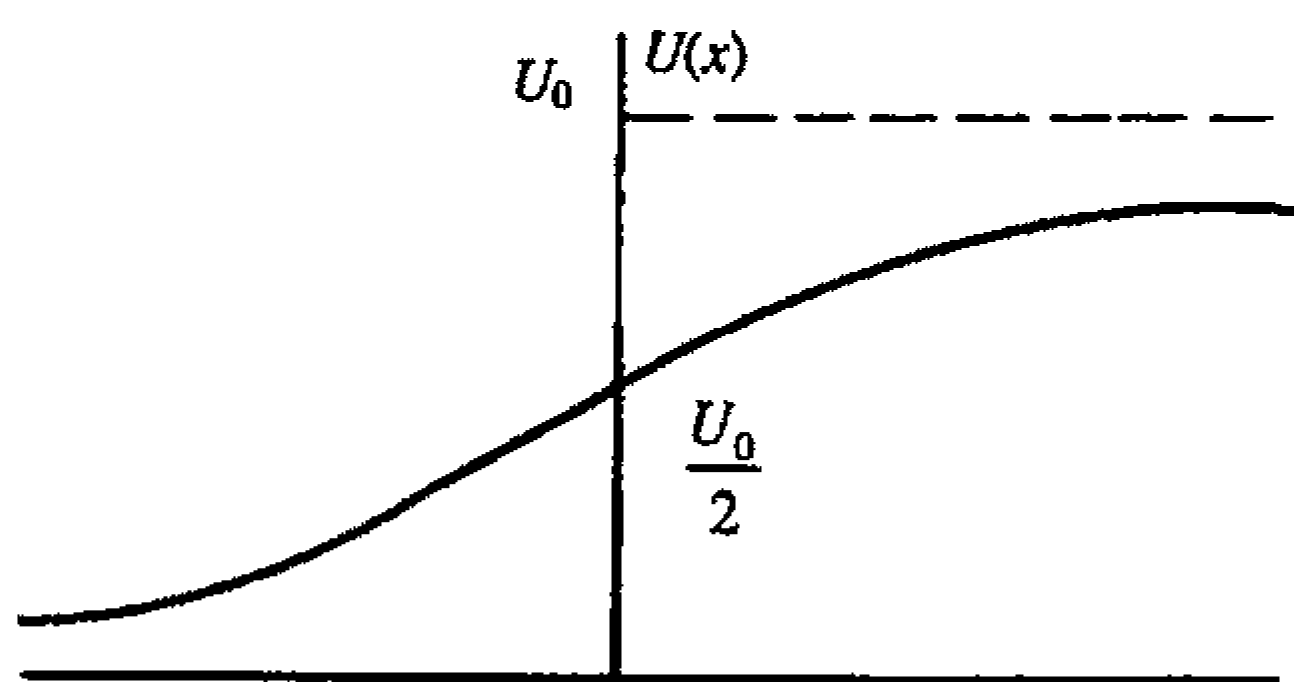
动量的概率分布$|\psi(p_x)|^2$也是对称于平均值$\bar{p}_x=p_0$的 Gauss 分布，标准偏差为$\delta p_x=\dfrac{\hbar}{2\delta x}$.

2.85　$U(x)=\dfrac{U_0}{1+\mathrm{e}^{-\alpha x}}$

题 2.85　求出粒子入射势垒为$U(x)=\dfrac{U_0}{1+\mathrm{e}^{-\alpha x}}$(题图 2.85)时的反射系数.

解　在本题势散射下的定态 Schrödinger 方程为

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\frac{U_0}{1+\mathrm{e}^{-\alpha x}}\right)\psi=0 \qquad (1)$$



题图 2.85

设 $x\to+\infty$ 时，$\psi(\infty)=\text{const}\times\mathrm{e}^{ik_2x}$. 作变量代换

$$\eta=-\mathrm{e}^{-\alpha x},\qquad -\infty<\eta<0$$

同时令

$$\psi=\eta^{-ik_2/a}u(\eta) \qquad (2)$$

其中 $u(\eta)$ 当 $\eta\to0$ (即 $x\to+\infty$)时应趋于一个常数. 将式(2)代入式(1)，结果 $u(\eta)$ 满足下列超几何方程

$$\eta(1-\eta)u''-\left(1+\frac{2ik_2}{\alpha}\right)(1-\eta)u'+\frac{(k_2^2-k_1^2)u}{\alpha^2}=0 \qquad (2.239)$$

其解为超几何函数

$$u=F\left(\mathrm{i}\frac{k_1-k_2}{\alpha},-\mathrm{i}\frac{k_1+k_2}{\alpha},-\frac{2\mathrm{i}}{\alpha}k_2+1,\eta\right) \qquad (2.240)$$

当 $\eta\to\infty$ (即 $x\to-\infty$)时 ψ 函数的渐近式为

$$\begin{aligned}\psi&\approx\eta^{-ik_2/\alpha}\left[C_1(-\eta)^{\mathrm{i}(k_2-k_1)/\alpha}+C_2(-\eta)^{\mathrm{i}(k_2+k_1)/\alpha}\right]\\&=(-\eta)^{-ik_2/\alpha}\left[C_1\mathrm{e}^{ik_1x}+C_2\mathrm{e}^{-ik_1x}\right]\end{aligned}$$

其中

$$C_1=\frac{\Gamma(-2\mathrm{i}k_1/\alpha)\Gamma(-2\mathrm{i}k_2/\alpha+1)}{\Gamma(-\mathrm{i}(k_1+k_2)/\alpha)\Gamma(-\mathrm{i}(k_1+k_2)/\alpha+1)}$$

$$C_2=\frac{\Gamma(2\mathrm{i}k_1/\alpha)\Gamma(-2\mathrm{i}k_2/\alpha+1)}{\Gamma(\mathrm{i}(k_1-k_2)/\alpha)\Gamma(\mathrm{i}(k_1-k_2)/\alpha+1)}$$

所求的反射系数 $R=\left|\frac{C_2}{C_1}\right|^2$，利用公式

$$\Gamma(x)\Gamma(1-x)=\frac{\pi}{\sin\pi x}$$

可得到

$$R=\left(\frac{\sinh\left[\pi(k_1-k_2)/\alpha\right]}{\sinh\left[\pi(k_1+k_2)/\alpha\right]}\right)^2$$

当 $E=U_0(k_2=0)$ 时 R 变为 I，而当 $E\to\infty$ 时 R 按下面规律趋于零

$$R=\left(\frac{\pi U_0}{\alpha\hbar}\right)^2\frac{2m}{E}\mathrm{e}^{-\frac{4\pi}{\alpha\hbar}\sqrt{2mE}}$$

经典力学极限情形下 R 变为 0.

2.86 $U(x)=\dfrac{U_0}{\cosh^2 ax}$

题 2.86 求粒子穿过势垒$U(x)=\dfrac{U_0}{\cosh^2 \alpha x}$的透射系数，设该粒子能量$E<U_0$.

解 设粒子能量$E>0$，此时 Schrödinger 方程为

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\frac{U_0}{\cosh^2 \alpha x}\right)\psi=0 \tag{1}$$

作变量代换$y=\tanh \alpha x$，并令

$$k=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE},\qquad S=\frac{1}{2}\left(-1+\sqrt{1-\frac{8mU_0}{\alpha^2\hbar^2}}\right)$$

代入式(1)，可得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left[(1-\eta^2)\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}\eta}\right]+\left[S(S+1)+\frac{k^2/\alpha^2}{1-\eta^2}\right]\psi=0$$

令

$$\psi=(1-\eta^2)^{-\frac{ik}{2\alpha}}u(\eta)$$

类似题 2.85 的计算，可知$u(\eta)$为超几何函数，结果有

$$\psi=(1-\eta^2)^{-\frac{ik}{2\alpha}}F\left(-\frac{ik}{\alpha}-S,-\frac{ik}{\alpha}+S+1,-\frac{ik}{\alpha}+1,\frac{1-\eta}{2}\right)$$

上述解在$x\to\infty$(即$\eta\to 1,\ 1-\eta\approx 2\mathrm{e}^{-x}$)时，$\psi$中只含透射波$\left(\sim \mathrm{e}^{ikx}\right)$，由超几何函数的性质可知，当$x\to-\infty$, $(\eta\to -1)$时ψ的渐进式为

$$\psi\sim C_1\mathrm{e}^{-ikx}+C_2\mathrm{e}^{ikx}$$

其中

$$C_1=\frac{\Gamma\left(\mathrm{i}\dfrac{k}{\alpha}\right)\Gamma\left(1-\dfrac{ik}{\alpha}\right)}{\Gamma(-s)\Gamma(1+s)},\qquad C_2=\frac{\Gamma\left(-\mathrm{i}\dfrac{k}{\alpha}\right)\Gamma\left(1-\dfrac{ik}{\alpha}\right)}{\Gamma\left(-\dfrac{ik}{\alpha}-s\right)\Gamma\left(-\dfrac{ik}{\alpha}+1+s\right)} \tag{2}$$

由式(2)可得$R=|C_1/C_2|^2$，而透射系数$D=1-R$，结果是

$$D=\begin{cases}\dfrac{\sinh^2\dfrac{\pi k}{\alpha}}{\sinh^2\dfrac{\pi k}{\alpha}+\cos^2\left(\dfrac{\pi}{2}\sqrt{1-8mU_0/\hbar^2\alpha^2}\right)}, & \dfrac{8mU_0}{\hbar^2\alpha^2}<1\\[2ex] \dfrac{\sinh^2\dfrac{\pi k}{\alpha}}{\sinh^2\dfrac{\pi k}{\alpha}+\cos^2\left(\dfrac{\pi}{2}\sqrt{1-8mU_0/\hbar^2\alpha^2}\right)}, & \dfrac{8mU_0}{\hbar^2\alpha^2}>1\end{cases} \tag{3}$$

式(3)中对 $U_0<0$ 也适用，这时粒子不是越过势垒而是越过势阱. 当

$$1+\frac{8m|U_0|}{\hbar^2\alpha^2}=(2n+1)^2$$

时 $D=1$. 越过势阱的粒子无反射.

2.87　幺正算符与幺正矩阵

题 2.87　(1) 给定一个本征值为 a_n，本征函数为 $u_n(x)\,(n=1,2,3,\cdots,N;0\leqslant x\leqslant L)$ 的 Hermite 算符 A，说明算符 e^{iA} 是幺正算符. (2) 用任意算符的矩阵构造出一 Hermite 算符的矩阵. (3) 给定另一 Hermite 算符 B 其本征值为 b_m，本征函数为 $v_m(x)$，构造出一幺正算符 V 的表示，使它把 B 的本征矢量转换成 A 的本征矢量.

解　(1) A 为 Hermite 算符，则 $A^\dagger=A$

$$(\mathrm{e}^{\mathrm{i}A})^\dagger=\left[\sum_n\frac{(\mathrm{i}A)^n}{n!}\right]^\dagger=\sum_n\frac{(-\mathrm{i}A^\dagger)^n}{n!}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}A^\dagger}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}A}=\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}A}\right)^{-1}$$

所以 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}A}$ 是幺正矩阵.

(2) 设 U_{mn} 为一般算符矩阵，令 $S_{mn}=U_{mn}+U_{mn}^\dagger$，则

$$(S^\dagger)_{mn}=U_{mn}^\dagger+U_{mn}=S_{mn}$$

S 是 Hermite 矩阵.

(3) 设有幺正算符 V 的表示 V_{mn}，使得

$$u_n(x)=V_{nm}v_m(x)$$

利用 $u_n(x),v_m(x)$ 的正交归一性

$$\int_0^L u_n(x)v_l^*(x)\mathrm{d}x=V_{nm}\int_0^L v_m(x)v_l^*(x)\mathrm{d}x=V_{nm}\delta_{ml}$$

即得

$$V_{nl}=\int_0^L u_n(x)v_l^*(x)\mathrm{d}x$$

2.88　Heisenberg 表象中算符运动方程

题 2.88　考虑 Hamilton 量为 $H=\dfrac{p^2}{2m}+\dfrac{m\omega^2x^2}{2}$ 的一维谐振子. (1) 求出“初始位置”和“初始动量”算符

$$x_0 = x\cos\omega t - \frac{p}{m\omega}\sin\omega t$$

$$p_0 = p\cos\omega t + m\omega x\sin\omega t$$

的期待值对时间的依赖关系. (2) 这两个算符与 Hamilton 量对易吗? (3) (1)和(2)的结果相容吗? 试讨论之. (4) 在 Heisenberg 表象中算符的运动方程为何? (5) 计算对易子$[p_0,x_0]$，在测量理论中它有什么意义?

解 (1)

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle x_0\rangle &= \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle x\rangle\right)\cos\omega t - \omega\langle x\rangle\sin\omega t \\ &\quad - \frac{1}{m\omega}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle p\rangle\right)\sin\omega t - \frac{\langle p\rangle}{m\omega}\cos\omega t \\ &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[x,H]}\cos\omega t - \omega\langle x\rangle\sin\omega t \\ &\quad - \frac{1}{m\omega}\cdot\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[p,H]}\sin\omega t - \frac{1}{m}\langle p\rangle\cos\omega t \\ &= 0\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle p_0\rangle &= \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle p\rangle\right)\cos\omega t - \omega\langle p\rangle\sin\omega t \\ &\quad + m\omega\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle x\rangle\right)\sin\omega t + m\omega^2\langle x\rangle\cos\omega t \\ &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[p,H]}\cos\omega t - \omega\langle p\rangle\sin\omega t \\ &\quad + m\omega\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[x,H]}\sin\omega t + m\omega^2\langle x\rangle\cos\omega t \\ &= 0\end{aligned}$$

故$\langle x_0\rangle$和$\langle p_0\rangle$都不随时间变化.

(2)

$$[x_0 H] = [x,H]\cos\omega t - \frac{[p,H]}{m\omega}\sin\omega t = \frac{\mathrm{i}\hbar p}{m}\cos\omega t + \mathrm{i}\hbar\omega x\sin\omega t$$

$$[p_0,H] = [p,H]\cos\omega t + m\omega[x,H]\sin\omega t = -\mathrm{i}\hbar m\omega^2 x\cos\omega t + \mathrm{i}\hbar\omega p\sin\omega t$$

即x_0、p_0不与H对易.

(3) (1)和(2)的结果是相容的. 由于x_0, p_0的定义式中显含时间t，因此x_0, p_0不与H对易并不说明它们不是守恒量. 正确的关系是

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle x_0\rangle = \left\langle\frac{\partial x_0}{\partial t}\right\rangle + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle[x_0,H]\rangle$$

(4) 在 Heisenberg 表象中算符的运动方程为$\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[A,H]$，知这时$x_0$、$p_0$的运动方程为

$$\frac{\mathrm{d}x_0}{\mathrm{d}t} = 0,\qquad \frac{\mathrm{d}p_0}{\mathrm{d}t} = 0$$

(5) $[p_0, x_0] = -\mathrm{i}\hbar$，这说明$\sqrt{\overline{\Delta p_0^2}}\sqrt{\overline{\Delta x_0^2}} \geqslant \frac{\hbar}{2}$，即规定了同时测准这两个物理量时，它们可能达到的精度上限之间的联系.

2.89　幺正算符的时间导数

题 2.89　(1) 设$A(t)$为幺正算符，对t可微，证明$\mathrm{i}\hbar\frac{dA}{dt}$可以表示成

$$\mathrm{i}\hbar\frac{dA}{dt} = BA \tag{1}$$

其中B为 Hermite 算符. (2) 设$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t} = BA$成立，$B$为 Hermite 算符，证明$AA^\dagger$满足方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{dAA^\dagger}{dt} = [B, AA^\dagger] \tag{2}$$

进而再证明，如$t = t_0$时$A(t_0)$为幺正算符，则$A(t)$总是幺正算符.

证明　(1) 因为$A(t)$是幺正的，$A(t)A^\dagger(t) = A^\dagger(t)A(t) = 1$. 对$t$求导，即得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(AA^\dagger) = \frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}A^\dagger + A\frac{\mathrm{d}A^\dagger}{\mathrm{d}t} = 0$$

即

$$\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}A^\dagger = -A\frac{\mathrm{d}A^\dagger}{\mathrm{d}t}$$

令

$$B = \mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}A^\dagger$$

则

$$B^\dagger = \left(\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}A^\dagger\right)^\dagger = -\mathrm{i}\hbar A\frac{\mathrm{d}A^\dagger}{\mathrm{d}t} = \mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}A^\dagger = B$$

即B为 Hermite 算符.

(2) 如$A(t)$满足(1)，而且$B(t) = B^\dagger(t)$，则式(1)的共轭方程为

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}A^\dagger}{\mathrm{d}t} = A^\dagger B \tag{3}$$

因此

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(AA^\dagger\right) = \mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}A^\dagger + \mathrm{i}\hbar A\frac{\mathrm{d}A^\dagger}{\mathrm{d}t} = BAA^\dagger - AA^\dagger B = [B, AA^\dagger]$$

此即式(2). 由

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}[AA^{-1}] = \frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}A^{-1} + A\frac{\mathrm{d}A^{-1}}{\mathrm{d}t} = 0$$

可得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}A^{-1} = -A^{-1}\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}A^{-1}$$

两边乘$-\mathrm{i}\hbar$，并利用式(1)，有

$$-i\hbar\frac{dA^{-1}}{dt} = i\hbar A^{-1}\frac{dA}{dt}A^{-1} = A^{-1}BAA^{-1} = A^{-1}B \tag{4}$$

比较式(3)和式(4)，可见，A^{-1}与$A^{\dagger}$满足同样的方程，所以$A^{-1}=\lambda A^{\dagger},\lambda$为任意常数. 但是，如果在时刻$t_0, A(t_0)A^{\dagger}(t_0)=1$，即$A(t_0)$为幺正算符，则$A^{\dagger}(t_0)=A^{-1}(t_0)$. 由此初条件可得出结论：$A^{\dagger}(t)=A^{-1}(t)$，即对$t$取任何值，$A(t)$为幺正算符.

2.90 积分方程 $B(t)=B(0)+i\left[A,\int_0^t B(\tau)d\tau\right]$ 的解

题 2.90 验证积分方程

$$B(t)=B(0)+i\left[A,\int_0^t B(\tau)d\tau\right]$$

有下列解

$$B(t)=e^{iAt}B(0)e^{-iAt}$$

其中A与时间无关.

证明 对该解求导

$$\frac{d}{dt}B(t)=iAe^{iAt}B(0)e^{-iAt}-ie^{iAt}B(0)e^{-iAt}A=i[A,B(t)]$$

上式两边在$0\sim t$对时间积分，即得

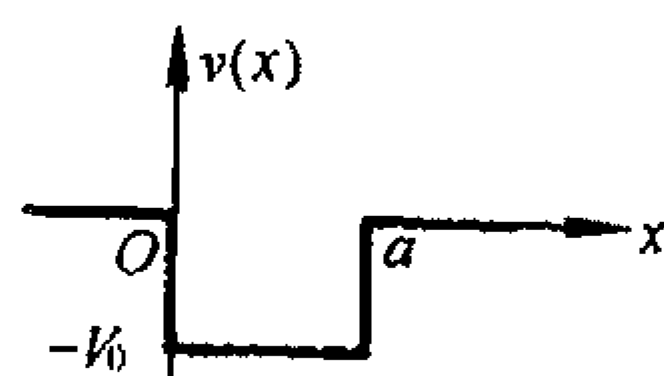
$$B(t)=B(0)+i\left[A,\int_0^t B(\tau)d\tau\right]$$

2.91 入射至半壁无限高势阱粒子的入射波和出射波的相位关系

题 2.91 考虑一维方势阱(题图 2.91)

$$v(x)=\begin{cases}\infty, & x<0\\ -V_0, & 0<x<a\\ 0, & x>a\end{cases}$$

(1) 对$E<0$，求出束缚在该势中粒子的波函数，写出确定E允许值的方程. (2) 设一具有能量$E>0$的粒子入射到该势上，求出入射波和出射波间的相位关系.



题图 2.91

解 Schrödinger 方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2}{dx^2}-V_0-E\right]\psi(x)=0, \qquad 0<x<a$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2}{dx^2}-E\right]\psi(x)=0, \qquad x>a$$

(1) $E<0$.

i) 先讨论$V_0<-E$情况. 此时可得波函数形式为

$$\psi(x)=\begin{cases}0, & x<0\\ A\sinh(kx), & 0<x<a\\ Be^{-k'x}, & x>a\end{cases}$$

其中

$$k=\sqrt{\frac{2m(-V_0-E)}{\hbar^2}},\qquad k'=\sqrt{\frac{2m(-E)}{\hbar^2}}$$

而波函数连续性条件，得

$$\begin{cases}A\sinh(ka)=Be^{-k'a}\\ Ak\cosh(ka)=-Bk'e^{-ka}\\ k\operatorname{csch}(ka)=-k'\end{cases}$$

因为当 $x>0$ 时恒有 $\operatorname{csch}x>0$，故无解(或说只有平凡解).

ii) 当 $V_0>-E, ik\to k, k=\sqrt{2m(V_0+E)/\hbar^2}$，确定能级的方程化作 $k\cot(ka)=-k'$

$$\psi(x)=\begin{cases}0, & x<0\\ A\sin(kx), & 0<x<a\\ Be^{-k'x}, & x>a\end{cases}$$

由波函数连续性条件及归一化，得

$$A=\left[\frac{2}{\frac{1}{k'}\sin^2(ka)+a-\frac{1}{2k}\sin(2ka)}\right]^{1/2}$$

$$B=\left[\frac{2}{\frac{1}{k'}\sin^2(ka)+a-\frac{1}{2k}\sin(2ka)}\right]^{1/2}e^{k'a}\sin(ka)$$

(2) $E>0$

$$\psi(x)=\begin{cases}0, & x<0\\ A\sin kx, & 0<x<a\\ B\sin(k'x+\varphi), & x>a\end{cases}$$

其中

$$k=\sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}},\qquad k'=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

$x=a$ 处，$\dfrac{\partial\ln\psi}{\partial\ln x}$ 连续，得

$$(ka)\cot(ka)=(k'a)\cot(k'a+\varphi)$$

所以

$$\varphi=\operatorname{arccot}\left(\frac{k}{k'}\cot(ka)\right)-k'a$$

在 $x>a$ 区域

$$\psi(x)=\frac{B}{2\mathrm{i}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'x-i\varphi}-\frac{B}{2\mathrm{i}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'x+i\varphi}$$

其中

$$\varphi_{\text{inc}}(x)\propto\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'x-i\varphi},\qquad\varphi_{\text{out}}(x)\propto\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'x+i\varphi}$$

所以出射波相对于入射波的相移为

$$\delta=2\varphi=2\left[\operatorname{arccot}\left(\frac{k}{k'}\right)\cot(ka)-k'a\right]$$

2.92 能量表象中的求和规则(4)

题 2.92 设 F 为 Hermite 算符，证明在能量表象中的求和规则

$$\sum_n(E_n-E_k)\left|F_{nk}^2\right|=\frac{1}{2}\langle k|[F,[H,F]]|k\rangle$$

证明

$$\begin{aligned}
&\sum_n(E_n-E_k)\left|\langle n|F|k\rangle\right|^2\\
&=\sum_n\left(\langle k|FH|n\rangle\langle n|F|k\rangle-\langle k|HF|n\rangle\langle n|F|k\rangle\right)\\
&=\langle k|FHF-HFF|k\rangle\\
&=\sum_n\left(\langle k|F|n\rangle\langle n|HF|k\rangle-\langle k|F|n\rangle\langle n|FH|k\rangle\right)\\
&=\langle k|FHF-FFH|k\rangle\\
&=\frac{1}{2}\langle k|FHF-HFF+FHF-FFH|k\rangle\\
&=\frac{1}{2}\langle k|[F,[H,F]]|k\rangle
\end{aligned}$$

第3章　中心力场束缚态问题

3.1　中心力场中有一定轨道角动量的定态中，$\langle \boldsymbol{r} \rangle = 0$

题 3.1　粒子在有心力场 $V(r)$中做定态运动，证明：在任何具有一定轨道角动量的定态中，粒子平均位置在原点.

证明　由于 Hamilton 量 $H = \dfrac{p^2}{2m} + V(r)$ 具有空间反演不变性. 对于一定轨道角动量的状态$|\psi\rangle$，具有确定的宇称，$\pi|\psi\rangle = a|\psi\rangle, a = \pm 1$. 这里$\pi$ 为宇称算符 $\pi\psi(\boldsymbol{r}) = \psi(-\boldsymbol{r})$. 由于$[\pi, \boldsymbol{r}]_+ = \pi\boldsymbol{r} + \boldsymbol{r}\pi = 0$，即 $\pi\boldsymbol{r}\pi = -\boldsymbol{r}$，则

$$\langle\psi|[\pi, \boldsymbol{r}]_+|\psi\rangle = 2a\langle\psi|\boldsymbol{r}|\psi\rangle = 2a\langle\boldsymbol{r}\rangle = 0$$

故$\langle\boldsymbol{r}\rangle_\psi = 0$.

事实上，这一结果可由宇称选择定则直接给出，这是由于 $\boldsymbol{r}$ 为奇宇称算符，其在宇称相同两态之间的矩阵元为 0.

3.2　Landau 隧落

题 3.2　质量为μ的粒子在中心力场$V(r) = -\dfrac{\alpha}{r^s}(\alpha > 0)$中运动. 证明：存在束缚态的条件为$0 \leqslant s \leqslant 2$；再进一步证明在$E \sim 0^-$附近存在无限多束缚态能级.

证明　由 Virial 定理，有

$$\langle T\rangle = \frac{1}{2}\left\langle\sum_i x_i \frac{\partial V}{\partial x_i}\right\rangle = \frac{1}{2}\left\langle r\frac{\partial V(r)}{\partial r}\right\rangle = \left\langle\frac{s\alpha}{2r^s}\right\rangle \geqslant 0$$

$$\Rightarrow s \geqslant 0$$

当$V(\pm\infty) \to 0$，且$V(r) \leqslant 0$束缚态的总能量需求小于等于零，又有

$$\langle E\rangle = \langle T + V\rangle = \left\langle\frac{s\alpha}{2r^s} - \frac{\alpha}{r^s}\right\rangle = \left\langle\left(\frac{s}{2} - 1\right)\frac{\alpha}{r^s}\right\rangle \leqslant 0$$

$$\Rightarrow s \leqslant 2$$

所以存在束缚态的条件为

$$0 \leqslant s \leqslant 2$$

接下来我们设想构造一个波包，其径向分布概率集中在 r_0 附近的Δr范围内，而且$\Delta r \ll r_0$，则

$$E = \left(\frac{s}{2} - 1\right)\frac{\alpha}{r^s} \approx \left(\frac{s}{2} - 1\right)\frac{\alpha}{r_0^s}$$

只要 r_0 足够大，$|E|$ 就可以小于任意指定正数，这样就得到无限多条密集在$E \sim 0^-$附近的能

级.

也可以这样考虑这个问题，构造如上的波包，则其构成必须受测不准关系的制约

$$\Delta r \cdot \Delta p \geqslant \hbar$$

由于束缚定态 $\langle p \rangle = 0$，所以

$$\langle p^2 \rangle = (\Delta p)^2 \geqslant \frac{\hbar^2}{(\Delta r)^2}$$

$$E = \langle T + V \rangle \geqslant \frac{\hbar^2}{2\mu(\Delta r)^2} - \frac{\alpha}{r_0^s}$$

由于 Δr 必须小于 r_0，如 $s > 2$，则对于足够大的 r_0，上式将给出 $E > 0$，不能成为束缚态；反之，如 $0 < s < 2$，对于足够大的 r_0，上式第二项起主要作用，将给出 $E < 0$，而且当 $r_0 \to \infty, E \to 0^-$，各能级密集在 $E \sim 0^-$ 附近.

3.3 原子单位

题 3.3 给出原子单位，进入 Coulomb 场 Schrödinger 方程的物理常量总共三个：$\hbar, e, \mu_e$. 为简化表述，可采用原子单位制；在计算中，形式上略去这三个常数，即相当于令它们为 1；在最后结果中，再添加上它们适当幂次的组合，凑得量纲正确即可.

解 Coulomb 场 Schrödinger 方程

$$H\psi = E\psi = -\frac{\hbar^2}{2\mu_e}\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\cdot\frac{\partial}{\partial r} + \frac{l(l+1)}{r^2}\right]\psi - \frac{e^2}{r}\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi$$

由量纲分析

$$\frac{[h]^2}{[\mu_e][r]^2} = \frac{[e]^2}{[r]} = \frac{[h]}{[t]}$$

由此可得各种特征单位，如质量特征单位 $[\mu_e]$，长度特征单位 $[r] = \dfrac{[h]^2}{[\mu_e][e]^2}$，时间特征单位 $[t] = \dfrac{[h]^3}{[\mu_e][e]^4}$；可组成速度、动量、能量的特征单位.

计算长度，在最后结果上乘以 $\rho_B = \dfrac{\hbar^2}{\mu_e e^2}$；

计算时间，在最后结果上乘以 $\dfrac{\hbar^3}{\mu_e e^4}$；

计算速度，在最后结果上乘以 $\dfrac{e^2}{\hbar}$；

计算动量，在最后结果上乘以 $\dfrac{\mu_e e^2}{\hbar}$；

计算能量，在最后结果上乘以 $\dfrac{\mu_e e^4}{\hbar^2}$.

3.4　三维无限深势阱

题 3.4　一个电子被禁闭在一个三维无限深势阱中. 三个平行于 x, y, z 轴的边分别长为 L. (1) 写出适当的 Schrödinger 方程. (2) 写出相应于最低可能的能量态的时间无关波函数. (3) 给出具有能量小于某给定值 E 的态数目 N 的表达式，假定 $N \gg 1$.

解　(1) 方程为

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial \psi(r,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \psi(r,t), \qquad 0 \leqslant x, y, z \leqslant L$$

其他情况，$\psi = 0$.

(2) 从以上方程可见波函数等于三个一维无限深势阱波函数之积，最低能态波函数为

$$\psi_{111}(x,y,z) = \psi_1(x)\psi_1(y)\psi_1(z)$$

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)$$

因此

$$\psi_{111}(x,y,z) = \left(\frac{2}{L}\right)^{3/2}\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi y}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi z}{L}\right)$$

相应能量为

$$E_{111} = \frac{3\hbar^2\pi^2}{2mL^2}$$

(3)

$$E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right)$$

要求能量小于给定 E 的态数 N，实际上是要求满足下面不等式

$$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \leqslant \frac{2mL^2}{\hbar^2\pi^2}E$$

的态数，这是一个求以 $\left(\frac{2mL^2}{\hbar^2\pi^2}E\right)^{1/2}$ 为半径的球体内整格点数的问题，$N \gg 1$时，对$n_i > 0$该数为球体体积的 1/8 倍，因此

$$N = \frac{1}{8}\cdot\frac{4\pi}{3}\left(\frac{2mL^2}{\hbar^2\pi^2}E\right)^{3/2} = \frac{4\pi}{3}\left(\frac{mL^2}{2\hbar^2\pi^2}E\right)^{3/2}$$

3.5　“夸克”禁闭

题 3.5　一个“夸克”(质量= $m_{\mathrm{p}}/3$)禁闭在一个长 2fm=2×10^{-15}m 的立方盒子中. 求从基态到第一激发态的激发能，用 MeV 表示.

解　三维盒子的能级为

$$E_{n_1n_2n_3} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\left(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2\right), \qquad n_i = 1, 2, \cdots$$

基态能为

$$E_{111}=\frac{3\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$$

第一激发态能为

$$E_{211}=\frac{6\hbar^2\pi^2}{2ma^2}=\frac{3\hbar^2\pi^2}{ma^2}$$

从基态到第一激发态的激发能为

$$\Delta E=\frac{3\hbar^2\pi^2}{2ma^2}=4.58\times10^8\text{eV}=458\text{MeV}$$

3.6 被空穴束缚的电子吸收谱的最大波长

题 3.6 氯化钠晶体内有些负离子空穴，每个空穴束缚一个电子. 可将这些电子看成束缚在箱中，箱的长度具有晶格常数的量级. 晶体处于室温，粗略估计被这些电子强烈吸收的电磁波的最长波长.

解 易知电子能级 $E_{nmk}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\left(n^2+m^2+k^2\right)$，式中 n、m、k 均是正整数，a 是箱的尺寸. 取 $a=1\text{Å}$，电子基态能级为

$$E_{111}=\frac{3\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\approx112\text{eV}$$

从电子的能级公式和 E_{111} 的量级，对于处于室温的晶体，考虑热分布可知，电子几乎全部位于基态，所以被强烈吸收的电磁波的最大波长为

$$\frac{2\pi\hbar c}{\lambda_{\max}}=E_{211}-E_{111}=112\text{eV}$$

$$\lambda_{\max}\approx110\text{Å}$$

3.7 处于无限深球方势阱基态电子对器壁压力

题 3.7 一电子被束缚在半径为 R 的球形匣子中，求处于基态的电子对匣壁的压力.

解 基态 $l=0$，径向波函数 $R(r)=\chi(r)/r$，得方程

$$\begin{cases}\chi''+\dfrac{2\mu E}{\hbar^2}\chi=0, & r>R\\ \chi=0, & r\geqslant R\end{cases}$$

再利用 $\chi(0)=0$，得

$$\chi_n=\sqrt{\frac{2}{R}}\sin\frac{n\pi}{R}r,\qquad n=1,2,3,\cdots$$

$$E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu R^2}n^2$$

这时力 F 为

$$F \equiv \left\langle -\frac{\partial V}{\partial R} \right\rangle = -\left\langle \frac{\partial H}{\partial R} \right\rangle = -\frac{\partial}{\partial R}\langle H \rangle = -\frac{\partial E}{\partial R}$$

电子处于基态，可知

$$F = -\frac{\partial E_1}{\partial R} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{\mu R^3}$$

压强 p 为

$$p = \frac{F}{4\pi R^2} = \frac{\pi \hbar^2}{4\mu R^5}$$

注　$\left\langle \frac{\partial H}{\partial R} \right\rangle$ 也可用绝热不变量求，本题的绝热不变量为 $f = \frac{R}{\pi}\sqrt{2\mu E_n}$.

3.8　粒子在两个不可穿透的同心球壳中的运动

题 3.8　一个质量为 m 的粒子被限制在半径为 $r=a$ 和 $r=b$ 的两个不可穿透的同心球面之间运动，不存在其他势. 求粒子的基态能量和归一化波函数.

解　设粒子的径向波函数为 $R(r)=\chi(r)/r$ ，则 $\chi(r)$ 满足方程

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi(r)}{\mathrm{d}r^2} + \left[\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi(r) = 0, \qquad a \leqslant r \leqslant b$$

对于基态，$l=0$ ，只有径向波函数才有意义. 由题设知 $V(r)=0$ ，若令 $K^2 = 2mE/\hbar^2$ ，则问题化成求解下列边值问题

$$\begin{cases} \chi'' + K^2\chi = 0 \\ \chi|_{r=a} = \chi|_{r=b} = 0 \end{cases}$$

由 $\chi(a)=0$ 定出解的形式为

$$\chi(r) = A\sin K(r-a)$$

由 $\chi(b)=0$ 定出 K 的可取值

$$K = \frac{n\pi}{b-a}, \qquad n = 1, 2, \cdots$$

粒子处于基态时，相应的 $n=1$ ，于是得到基态能量

$$E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m(b-a)^2}$$

最后，由归一化条件

$$\int_a^b R^2(r) r^2 \mathrm{d}r = \int_a^b \chi^2(r)\mathrm{d}r = 1$$

定出

$$A = \sqrt{\frac{2}{b-a}}$$

于是，归一化的基态径向波函数为

$$R(r) = \sqrt{\frac{2}{b-a}}\frac{1}{r}\sin\frac{\pi}{b-a}(r-a)$$

而基态归一化波函数为

$$\psi(r)=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\sqrt{\frac{2}{b-a}}\frac{1}{r}\sin\frac{\pi(r-a)}{b-a}$$

3.9 谐振子基态是最小不确定性态

题 3.9 (1) 对于一个谐振子 $H=\frac{1}{2}\left(m^{-1}p^2+kx^2\right)$，证明其基态能量具有与不确定性原理相容的最小值. (2) 使测不准关系取最小值的波函数是 Gauss 型 $e^{-\alpha x^2}$ 波包. 利用这一事实，不解任何微分方程，求 α. (3) 利用升降算符，不解微分方程，写出谐振子的第一激发态的波函数(不归一). (4) 对于一个三维谐振子，在球极坐标中写出简并第一激发态的波函数，同时是 l_2 的本征态.

解 (1)谐振子基态是偶宇称的，所以

$$\bar{x}=\langle 0|x|0\rangle=0,\qquad \bar{p}=\langle 0|p|0\rangle=0$$

$$(\Delta x)^2=\overline{x^2},\quad (\Delta p)^2=\overline{p^2}$$

不确定性关系

$$(\Delta x)^2\cdot(\Delta p)^2\geqslant\frac{\hbar^2}{4}$$

所以

$$\begin{aligned}\bar{E}&=\frac{\overline{p^2}}{2m}+\frac{k}{2}\overline{x^2}\\&\geqslant\sqrt{\frac{k}{m}}\sqrt{\overline{p^2}\cdot\overline{x^2}}\\&\geqslant\frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{k}{m}}=\frac{\hbar\omega}{2}=E_0\end{aligned}$$

即基态能量具有与不确定性原理相容的最小值.

(2)

$$\overline{x^2}=\frac{\int_{-\infty}^{\infty}e^{-2\alpha x^2}x^2\mathrm{d}x}{\int_{-\infty}^{\infty}e^{-2\alpha x^2}\mathrm{d}x}=\frac{1}{4}\alpha$$

$$\overline{p^2}=\frac{-\hbar^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\alpha x^2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}e^{-\alpha x^2}\mathrm{d}x}{\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x e^{-2\alpha x^2}}=\hbar^2\alpha$$

$$E=\frac{\hbar^2}{2m}\alpha+\frac{k}{2}\cdot\frac{1}{4\alpha}$$

当

$$\alpha=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{km}{\hbar^2}}=\frac{m\omega}{2\hbar}$$

时能量最小，所以

$$\alpha = \frac{m\omega}{2\hbar}$$

(3)

$$a = \mathrm{i}\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(p - \mathrm{i}m\omega x), \qquad a^\dagger = -\mathrm{i}\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(p + \mathrm{i}m\omega x)$$

$$H = \left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

基态波函数为$|0\rangle$，则有

$$H|0\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega|0\rangle$$

即

$$a^\dagger a|0\rangle = 0$$

$$H\left(a^\dagger|0\rangle\right) = \frac{1}{2}\hbar\omega a^\dagger|0\rangle + \hbar\omega a^\dagger a\ a^\dagger|0\rangle = \frac{3}{2}\hbar\omega a^\dagger|0\rangle$$

所以

$$|1\rangle = a^\dagger|0\rangle \to \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}x\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right), \qquad \text{“}\to\text{”表示转入坐标表象}$$

(4) 三维谐振子的波函数为

$$\psi_{n_1n_2n_3}(\boldsymbol{r}) = \psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)\psi_{n_3}(z)$$

基态$(n_1,n_2,n_3) = (0,0,0)$.

第一激发态$(n_1,n_2,n_3) = (1,0,0),(0,1,0),(0,0,1)$

$$\psi_{100}(\boldsymbol{r}) = N_0^2N_1 2ax\exp\left(-\frac{1}{2}a^2r^2\right)$$

$$\psi_{010}(\boldsymbol{r}) = N_0^2N_1 2ay\exp\left(-\frac{1}{2}a^2r^2\right)$$

$$\psi_{001}(\boldsymbol{r}) = N_0^2N_1 2az\exp\left(-\frac{1}{2}a^2r^2\right)$$

将x, y, z，用球谐函数展开，重新组合可得L_z的本征态

$$\psi_m(r) = N_m\exp\left(-\frac{1}{2}a^2r^2\right)rY_{1m}(\theta,\varphi)$$

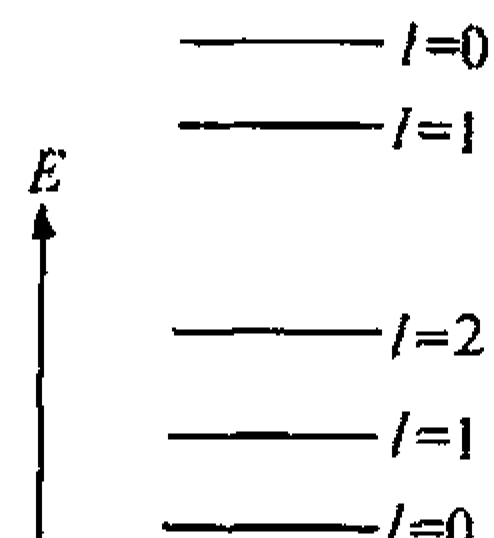
$$N_m = \frac{a^2}{\sqrt{2}}$$

注　式中$a = \sqrt{\dfrac{m\omega}{\hbar}}$是通常的定义，与(4)中不同.

3.10　中心力场运动粒子各能级径向波函数的结点数

题 3.10　题图 3.10 给出了在某个三维中心势中运动的无自旋粒子的 6 个最低能级及其

相应的角动量. 这一能谱中不存在偶然简并，给出各能级相应径向波函数的节点数目(在节点两边波函数符号不同).



题图 3.10

解 三维中心势中的粒子径向波函数 $R(r)=\frac{\chi(r)}{r}$，而 $\chi(r)$ 的方程当给定 l 值时，和一维 Schrödinger 方程相同. 因此当其能谱不存在偶然简并时，其径向波函数的节点行为同一维波函数一样. 对于束缚态，仍然有斯特姆定理：基态径向波函数的节点数目为 0，第 n 激发态径向波函数的节点数目为 n.

现在考虑 $l=0$ 的 3 个能级，其径向波函数的节点数从下到上依次是：0，1，2，关于 $l=1$ 和 $l=2$ 的能级，在添加对应项 $\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}$ 改变位势之后，分别再按上述类似讨论.

总之，本题所给 6 个最低能态径向波函数的节点数从下到上依次是：0, 1, 0, 0, 1, 2.

3.11 三维各向同性谐振子能级的占有数和简并度

题 3.11 一电荷为 q-质量为 m 的粒子被一个球对称线性回复力束缚在原点. 能级间距是 $\hbar\omega_0$，基态能量是 $E_0=\frac{3}{2}\hbar\omega_0$，态可由 Descartes 坐标(三个一维谐振子)或球坐标(中心场，分解成径向运动和角向运动)描述. (1) 在 Descartes 坐标系中，将基态和前三个激发态的占有数列表，求出各个能级的简并度. (2) 在球坐标中，写出径向运动方程(不要求解)(注意在球坐标中 $\nabla^2=\frac{1}{r^2}\cdot\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}-\frac{L^2}{r^2}$，$L^2$ 是总轨道角动量算子的平方除以 $\hbar^2$). 指出并画出有效势. 对于给定的角动量，画出径向波函数的基态及相同 l 值的另两个态. (3) 对于(1)中的四个能级，写下这些能级中所含的角动量及宇称. 将总简并度与(1)的结果比较. (4) 第二激发态 ($E_2=7\hbar\omega_0/2$) 有线性 Stark 效应吗？为什么？比较这一谐振子能级与非相对论氢原子第二激发能级($n=3$)之间的同异.

解 (1) 见表 3.1

(2) $\psi(r)=R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$. 径向波函数为 R，满足如下方程

$$\frac{1}{r^2}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}R\right)+\left[\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\frac{m}{2}\omega^2r^2\right)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R=0$$

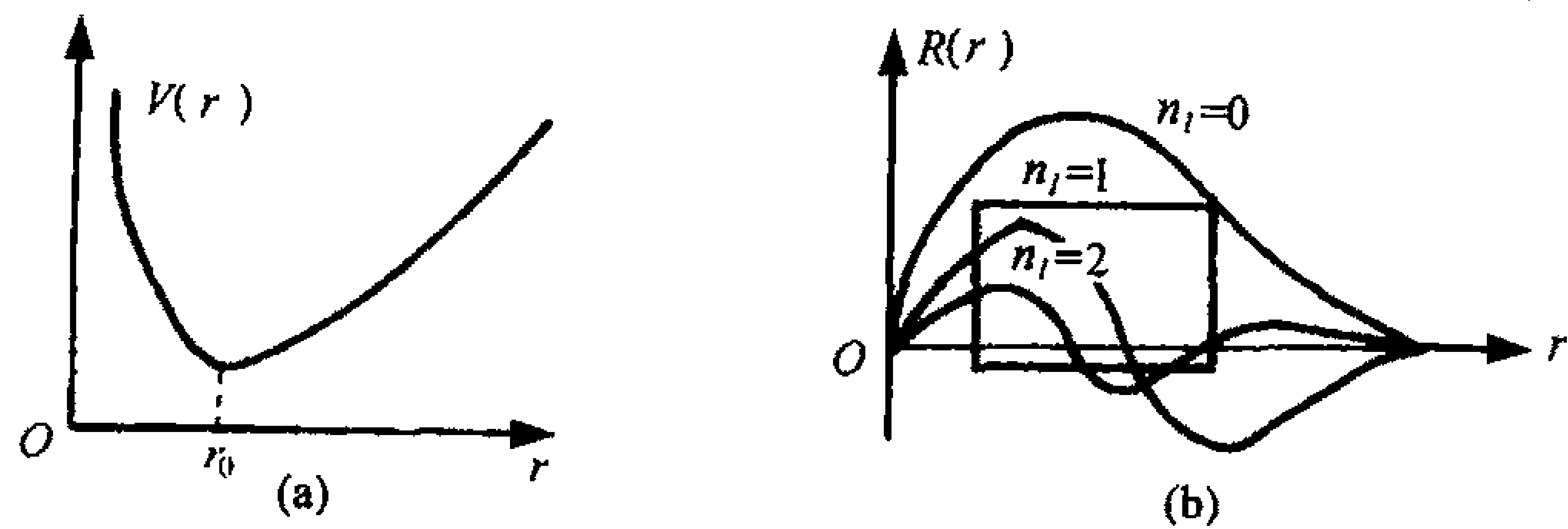
而有效势为

$$V_{\text{eff}}=\frac{1}{2}m\omega^2r^2+\frac{\hbar^2l(l+1)}{2mr^2}l$$

题图 3.11(a)中 $r_0=\left[\frac{\hbar^2l(l+1)}{m^2\omega^2}\right]^{1/4}$. 题图 3.11(b)给出了相同 l 的前三态的波函数形状. 注意波函数的节点数等于 n_r.

表 3.1

能 级	占 有 数	简 并 度
E_0	$\|0,0,0\rangle$	1
E_1	$\|1,0,0\rangle$, $\|0,1,0\rangle$, $\|0,0,1\rangle$	3
E_2	$\|2,0,0\rangle$, $\|0,2,0\rangle$, $\|0,0,2\rangle$ $\|1,1,0\rangle$, $\|1,0,1\rangle$, $\|0,1,1\rangle$	6
E_3	$\|3,0,0\rangle$, $\|0,3,0\rangle$, $\|0,0,3\rangle$ $\|2,1,0\rangle$, $\|0,2,1\rangle$, $\|1,0,2\rangle$ $\|1,2,0\rangle$, $\|0,1,2\rangle$, $\|2,0,1\rangle$ $\|1,1,1\rangle$	10



题图 3.11

(3) 见表 3.2

表 3.2

E	l	m	p	D
E_0	0	0	+	1
E_1	1	0，±1	−	3
E_2	2 0	0，±1，±2 0	+	6
E_3	3 1	0，±1，±2，±3 0，±1	−	10

(4) 没有线性 Stark 效应. 因为 x 是奇算子，而 E_2 的所有简并态都具有偶宇称，因而 H' 的矩阵元在 E_2 能级子空间中为零.

对于氢原子第二激发态，$n=3$，它的简并态既有宇称为偶的态，又有奇宇称态. 存在线性 Stark 效应.

3.12　三维耦合谐振子

题 3.12　(1) 一个质量为 m 的非相对论粒子在一势场中运动，势为

$$V(x,y,z)=A(x^2+y^2+2\lambda xy)+B(z^2+2\mu z)$$

其中 $A>0, B>0, |\lambda|<1$，μ 是任意的. 求能量的本征值. (2) 现在使势变成 V_{new}. 对于 $z>-\mu$ 及任何 x, y, $V_{\text{new}}=V$, V 与(1)相同. 对于 $z<-\mu$ 及任何 x, y, $V_{\text{new}}=+\infty$，求基态能量.

解　(1)选两个新的变量 μ,t，使

$$\mu = \frac{1}{\sqrt{2}}(x+y), \qquad t = \frac{1}{\sqrt{2}}(x-y)$$

反解之有

$$x = \frac{\mu + t}{\sqrt{2}}, \qquad y = \frac{\mu - t}{\sqrt{2}}$$

$$V(x,y,z) = A\left[1/2(\mu^2 + t^2 + 2\mu t) + \frac{1}{2}(\mu^2 + t^2 - 2\mu t) + 2\lambda \cdot \frac{1}{2}(\mu^2 - t^2)\right]$$

$$+B(z^2 + 2\mu z) = A\left[(1+\lambda)\mu^2 + (1-\lambda)t^2\right] + B(z^2 + 2\mu z)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \mu} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{\partial}{\partial t} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \left(\frac{\partial^2}{\partial \mu^2} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{\partial^2}{\partial \mu \partial t} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}\right)\frac{1}{\sqrt{2}} + \left(\frac{\partial^2}{\partial t \partial \mu} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{\partial^2}{\partial t^2} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}\right)\frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial \mu} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{\partial}{\partial t} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} = \left(\frac{\partial^2}{\partial \mu^2} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{\partial^2}{\partial \mu \partial t} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}\right)\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\partial^2}{\partial t \partial \mu} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{\partial^2}{\partial t^2} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}\right)$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial \mu^2} + \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

这样本征方程为

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \mu^2} + \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\phi(\mu,t,z) + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - V(\mu,t,z)\right] \cdot \phi(\mu,t,z) = 0$$

令

$$\phi(\mu,t,z) = U(\mu)T(t)Z(z)$$

有

$$\frac{\partial^2}{\partial \mu^2}U(\mu) - \frac{2m}{\hbar^2}\left[E_1 - A(1+\lambda)\mu^2\right]U(\mu) = 0$$

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}T(t) - \frac{2m}{\hbar^2}\left[E_2 - A(1-\lambda)t^2\right]T(t) = 0$$

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2}Z(z) - \frac{2m}{\hbar^2}\left[E_3 - B(z^2 + 2\mu z)\right]Z(z) = 0$$

$$E = E_1 + E_2 + E_3$$

解之得

$$E_1 = \left(n_1 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_1, \qquad \omega_1 = \sqrt{\frac{2A}{m}(1+\lambda)}$$

$$E_2 = \left(n_2 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_2, \qquad \omega_2 = \sqrt{\frac{2A}{m}(1-\lambda)}$$

$$E_3 = \left(n_3 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_3 - B\mu^2, \qquad \omega_3 = \sqrt{\frac{2B}{m}}$$

$$E = E_1 + E_2 + E_3$$

(2) 现在当 $z < -\mu$ 时 $V = \infty$，而 $z > -\mu$ 时与以上一样，这要求波函数在 $z \to -\mu$ 时趋于零. 这自然要 n_3 为奇数. 所以基态当 $n_1 = n_2 = 0, n_3 = 1$ 时的能量为

$$E = \frac{1}{2}\hbar(\omega_1 + \omega_2) + \frac{3}{2}\hbar\omega_3 - B\mu^2$$

3.13 对数势中运动的粒子

题 3.13 一质量为 m 的粒子，在一对数势中运动，这势可以写成 $V(r) = C\ln(r/r_0)$. 请证明：(1) 所有的能量本征态都有相同的均方速度. 并求出之. (2) 任何两个能量态间的能量间隔是与质量 m 无关的.

证明 (1)

$$\langle v^2 \rangle = \left\langle \frac{p^2}{m^2} \right\rangle = \frac{1}{m^2}\int \mathrm{d}^3 r \psi^* p^2 \psi$$

对于定态有

$$\langle T \rangle = \frac{1}{2}\langle \boldsymbol{r} \cdot \nabla V \rangle$$

所以

$$\langle v^2 \rangle = \left\langle \frac{p^2}{m^2} \right\rangle = \frac{1}{m} \cdot 2\langle T \rangle = \frac{1}{m}\langle \boldsymbol{r} \cdot \nabla V \rangle$$

$$= \frac{1}{m} \cdot \int \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} \cdot \left(r\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} C\ln\frac{r}{r_0} \right) \psi^* \psi = \frac{C}{m}\int \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} \|\psi\|^2 = \frac{C}{m}$$

对任何本征态均成立.

(2)
$$\frac{\partial E_n}{\partial m} = \langle \,|\frac{\partial H}{\partial m}|\, \rangle = \langle \,|-\frac{p^2}{2m^2}|\, \rangle = -\frac{1}{2}\langle \,|V^2|\, \rangle = -\frac{1}{2} \cdot \frac{C}{m}$$

则

$$\frac{\partial (E_n - E_{n-1})}{\partial m} = -\frac{1}{2} \cdot \frac{C}{m} + \frac{1}{2} \cdot \frac{C}{m} = 0$$

所以 $E_n - E_{n-1}$ 是与 m 无关的.

3.14 氢原子受一无限高势壁的作用

题 3.14 假定孤立氢原子的本征态都已知，且按通常的记号，写为 $\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$. 设有一氢原子的原子核距无限高势壁为 d，显而易见，势壁力图使氢原子变形. (1) 当 $d \to 0$ 时，写出这个氢原子基态波函数的形式. (2) 求出所有其他半空间中该氢原子($d \to 0$)的本征函数，用 R_{nl} 和 Y_{lm} 表示.

解 (1) 建立坐标系，原点取为原子核所在位置，Z 轴垂直于势壁表面. 由于 $d \to 0$，在半空间. $Z > 0$ 内，Schrödinger 方程的解仍是 $R_{nl}Y_{lm}$，但须满足 $\theta = \frac{\pi}{2}$ 时 $\psi = 0$ 的条件，即

只有 $l+m=$ 奇数的那些解才是满足要求的，如

$$Y_{1,0}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta\bigg|_{\theta=\frac{\pi}{2}}=0$$

所以基态波函数为 $R_{21}Y_{10}$.

(2) 所有其他本征态为 $R_{nl}Y_{lm}$，$l+m=$ 奇数，即 $m=l-1,l-3,\cdots,-l+1$ 为 l 重简并.

注 这种做法同问题的对称性密切相关.

3.15 氢原子波函数随时间的演化

题 3.15 在 $t=0$ 时氢原子的波函数为

$$\psi(r,0)=\frac{1}{\sqrt{10}}\left[2\psi_{100}+\psi_{210}+\sqrt{2}\psi_{211}+\sqrt{3}\psi_{21-1}\right]$$

其中指标是量子数 n、l、m 的值. 忽略自旋和辐射跃迁. (1) 什么是该体系能量的期望值? (2)在 t 时刻体系处于 $l=1, m=1$ 态的概率是什么? (3)电子在质子 10^{-10}cm 之内的概率是什么 ($t=0$ 时) (这里可采用近似结果)? (4) 波函数怎样随时间变化? 即求 $\psi(\boldsymbol{r},t)$. (5) 假设一次测量发现 $L=1, L_x=1$，用上面的 ψ_{nlm} 描述这一测量后瞬间的波函数.

解 (1)能量期望值为

$$E=\langle\psi|H|\psi\rangle=\frac{1}{10}(4E_1+6E_2)=\frac{11}{20}E_1=-7.68(\text{eV})$$

其中，$E_1=-\dfrac{me^4}{2\hbar^2}$ 为氢原子基态能量.

(2)

$$|\psi(t)\rangle=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}|\psi(0)\rangle$$

$$\langle n11|\psi(t)\rangle=\delta_{n2}\langle 211|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}|\psi(t)\rangle=\delta_{n2}\sqrt{\frac{1}{5}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_2t/\hbar}$$

所以概率

$$P=\left|\langle n11|\psi(t)\rangle\right|^2=\frac{1}{5}\delta_{n2}$$

当 $n=2$ 时，$P=\dfrac{1}{5}$，其他为零.

(3) 令 $\alpha=10^{-10}$cm

$$\begin{aligned}P&=\int_0^\alpha r^2\mathrm{d}r\psi^*\psi\mathrm{d}\Omega\\&=\int_0^\alpha r^2\mathrm{d}r\frac{1}{10}\left(4|R_{10}|^2+6|R_{21}|^2\right)\end{aligned}$$

$$|R_{10}|^2=\frac{4}{a^3}\mathrm{e}^{-2r/a},\qquad |R_{21}|^2=\frac{r^2}{24a^5}\mathrm{e}^{-r/a},\qquad a=5.29\times10^{-9}\text{cm}$$

因为 $\alpha\ll a$，所以

$$\mathrm{e}^{-2r/a}\approx1-\frac{2r}{a},\qquad \mathrm{e}^{-r/a}\approx1-\frac{r}{a}$$

$$P \approx \frac{4}{10}\int_0^a r^2 dr \frac{4}{a^3}\left(1-\frac{2r}{a}\right)+\frac{6}{10}\int_0^a r^2 dr \frac{r^2}{24a^5}\left(1-\frac{r}{a}\right)$$

$$=\left[\frac{4}{3}\left(\frac{\alpha}{a}\right)^3-2\left(\frac{\alpha}{a}\right)^4\right]\frac{4}{10}+\frac{6}{10}\left[\frac{1}{120}\left(\frac{\alpha}{a}\right)^5-\frac{1}{144}\left(\frac{\alpha}{a}\right)^6\right]$$

$$\approx \frac{8}{15}\left(\frac{\alpha}{a}\right)^3 \approx 3.6\times 10^{-6}$$

(4)
$$\psi(r,t)=e^{-iHt/\hbar}\psi(r,0)$$

$$=\sqrt{\frac{1}{10}}\left(2e^{-i\omega_1 t}\psi_{100}+e^{-i\omega_2 t}\psi_{210}+\sqrt{2}e^{-i\omega_2 t}\psi_{211}+\sqrt{3}e^{-i\omega_2 t}\psi_{21-1}\right)$$

式中

$$\omega_1=\frac{E_1}{\hbar},\qquad \omega_2=\frac{E_2}{\hbar}$$

(5) 由于 $L=1$ 所以 $n=2$. 于是，所求态矢为

$$|\ \rangle = C_+|211\rangle + C_0|210\rangle + C_-|21-1\rangle$$

由题意知 $L_x|\ \rangle=|\ \rangle$，而 $L_x=(L_+ + L_-)/2$，所以 $L_x|\ \rangle=|\ \rangle$ 成为

$$\frac{1}{2}\left(\sqrt{2}C_0|211\rangle+\sqrt{2}(C_+ + C_-)|210\rangle+\sqrt{2}C_0|21-1\rangle\right)$$

$$=C_+|211\rangle+C_0|210\rangle+C_-|21-1\rangle$$

得

$$C_+=\frac{\sqrt{2}}{2}C_0,\qquad C_-=\frac{\sqrt{2}}{2}C_0$$

所以

$$|\ \rangle=\frac{1}{2}C_0\left[\sqrt{2}|211\rangle+2|210\rangle+\sqrt{2}|21-1\rangle\right]$$

归一化 $C_-=\frac{1}{\sqrt{2}}$，所以

$$|\ \rangle=|211\rangle+\sqrt{2}|210\rangle+|21-1\rangle$$

3.16　电子偶素

题 3.16　氢原子的基态能量和 Bohr 半径为

$$E_0=-\frac{e^2}{2\alpha_0},\qquad \alpha_0=\frac{\hbar^2}{me^2}$$

其中 m 是系统的折合质量. $m_{电子}=9.11\times10^{-28}$g，$m_{质子}=1.67\times10^{-24}$g，$e=1.6\times10^{-19}$c，$\hbar=1.05\times10^{-27}$ erg[①] · s. (1) 计算电子偶素的基态能量和 Bohr 半径. (2) 由于电子有自旋，电子偶素基态的简并度是多少？写出具有确定总自旋值的可能自旋波函数及其相应的本征值.

① erg 为功的单位，1erg= 10^{-7}J。

(3) 电子偶素的基态会发生衰变，湮灭为光子，计算这个过程中释放出的能量和角动量，证明终态至少有两个光子.

解 (1) 电子偶素的折合质量为电子质量的一半 $m=\frac{1}{2}m_{电子}$，将所给数据代入题设所给公式，得到

$$a_0=1.06\times10^{-8}\text{cm},\qquad E_0=-6.8\text{eV}$$

(2) 电子偶素基态的简并度为 4. 记正电子为粒子 1，电子为粒子 2，单个粒子的自旋在 z 方向分量的本征态为 α 和 β. α 和 β 分别对应于本征值 $\frac{\hbar}{2}$，$-\frac{\hbar}{2}$. 则基态的具有确定总自旋 $S=S_1+S_2$ 和总自旋 z 分量 $S_z=S_{1z}+S_{2z}$ 的本征态为

$$\alpha(1)\alpha(2),\qquad S=\hbar,\qquad S_z=\hbar$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\alpha(2)\beta(2)+\beta(1)\alpha(2)\right],\qquad S=\hbar,\qquad S_z=0$$

$$\beta(1)\beta(2)\qquad S=\hbar,\qquad S_z=-\hbar$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)\right],\qquad S=0,\qquad S_z=0$$

(3) 正负电子湮灭时，放出的能量主要来自于两者的静质量

$$\Delta E=2m_{电子}c^2=1.02\text{MeV}$$

释放出的角动量的大小取决于湮灭前电子偶素所处的状态. 在基态，轨道角动量为 0，没有贡献，所以对 $S=0$ 的态来说，释放的角动量为 0，即没有角动量放出. 对 $S=\hbar$ 的那些态来说，释放出的角动量大小为 $\Delta J=\sqrt{1+1}\hbar=\sqrt{2}\hbar$.

下面来证明终态至少有两个光子. 假设电子偶素湮灭后只放出一个光子，则过程的能量和动量不可能守恒. 道理是这样的：光子只要有能量 E，就一定同时带有大小为 E/C 的动量. 于是光子在任何一个参考系中动量不为 0，而在电子偶素的静止参考系中，过程前后动量都应为 0，因此可以断定终态至少有两个光子.

3.17　电子在势场 $V=kr$，$k>0$ 中运动

题 3.17　考虑电子在球对称势中的运动，$V=kr, k>0$. (1) 用不确定性原理估计基态能量. (2) 用 Bohr-Sommerfeld 量子化条件计算基态能量. (3) 用你选的尝试波函数通过变分原理重复上面的计算. (4) 精确求解基态的能量本征值和本征函数(**提示**　利用 Fourier 变换). 对于非零角动量的态，给出等效势.

解 (1)

$$E=\frac{P^2}{2m}+kr$$

由不确定性关系可知

$$\overline{r^2}\cdot\overline{P^2}\sim\frac{\hbar^2}{4},\qquad \bar{r}\approx\sqrt{\overline{r^2}}$$

我们立刻可算出能量 E 的最小值为

$$E_0 \approx \frac{3}{2}(k^2\hbar^2/4m)^{1/3}$$

(2) Bohr-Sommerfeld 量子化条件为

$$\oint P_r \mathrm{d}r = n_r h, \qquad \oint P_\phi \mathrm{d}\phi = n_\phi h$$

粒子是在 $\theta = \frac{\pi}{2}$ 平面内运动. 基态取 $n_r = 0, n_\phi = 1$ ，圆轨道，半径为 a

$$P_\phi = m\omega a^2 = \hbar$$

而 $m\omega^2 a = k$ ，所以

$$a = \left(\frac{\hbar^2}{mk}\right)^{1/3}$$

$$E_0 = \frac{P_\phi^2}{2m} \cdot \frac{1}{a^2} + ka = \frac{3}{2}\left(k^2\hbar^2/m\right)^{1/3}$$

(3) 考虑尝试波函数为 $\psi(r) = e^{-\lambda r}$ ，λ 为变分参量

$$\bar{H} = \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \left[\frac{3}{2}\cdot\frac{k}{\lambda} + \frac{\hbar^2}{2m}\lambda^2\right]$$

$\frac{\delta \bar{H}}{\delta \lambda} = 0$ ，解得

$$\lambda_0 = \left(\frac{3}{2}\cdot\frac{km}{\hbar^2}\right)^{1/3}$$

所以

$$E_0 = \frac{3}{2}\left(\frac{9k^2\hbar^2}{4m}\right)^{1/3}$$

(4) Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}\chi + (kr - E)\chi = 0$$

这里 $\chi = rR, R$ 为径向波函数. 由于是基态，(θ,φ) 方向的波函数是常数. 作变换

$$y = \left(\frac{2mk}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}\left(r - \frac{E}{k}\right)$$

方程化为 $(\chi(r) = \chi(y))$

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi(y)}{\mathrm{d}y^2} - y\chi(y) = 0, \qquad y > 0$$

这是 Airy 函数方程.

角动量不为零时的有效势为

$$V_{\text{eff}} = kr + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$$

3.18 重夸克之间近似相互作用势$V(r)=A+Br$

题 3.18 重夸克之间的相互作用经常用一个自旋无关的非相对论的势来近似，这个势是径向参数r的线性函数，这里r是夸克之间的距离矢量. 即$V(r)=A+Br$. 著名的粲粒子ψ和ψ'(静止能量分别为 3.1GeV 和 3.7GeV)就被认为是质量为 1.5GeV/c^2的 c 夸克和相同质量的反夸克在上述线性势下构成的零角动量的$n=0$和$n=1$的束缚态. 类似地，新发现的γ和γ'被认为是由 b 夸克及其反夸克在相同的作用势下构成的零角动量的$n=0$和$n=1$的束缚态. b 夸克的静止质量$m_b=4.5\mathrm{GeV}/c^2$，γ的静止能量为 9.5GeV. (1) 用量纲分析方法，推出ψ和ψ'的能量间隔和γ与γ'的能量间隔的关系；然后，推算γ'的静止能量(所有能量均用 GeV 表示). (2) 将$n=2$态(轨道角动量为零)上的粲粒子称为ψ''，用 M.K.B 近似法估算ψ'与ψ''之间的能级间隔，并将这个能级间隔用ψ与ψ'的能级间隔表示；然后，给出ψ''的静止能量的数值估算.

解 在夸克和反夸克所组成的质心系中，相对运动方程为

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu^2}\nabla_r^2+V(r)\right)\psi(r)=E_R\psi(r),\qquad \mu=\frac{m_q}{2}$$

式中E_R为相对运动能量，m_q为夸克质量. 在零角动量的情况下，上述方程在球坐标系中的形式为

$$\left(-\frac{2\hbar}{2\mu}\cdot\frac{1}{r^2}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)+V(r)\right)R(r)=E_R R(r)$$

令$R(r)=\chi_0(r)/r$，则$\chi_0(r)$满足方程

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi_0}{\mathrm{d}r^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}(E_R-V(r))\chi_0=0\tag{1}$$

以$V(r)=A+Br$代入

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi_0}{\mathrm{d}r^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}(E_R-A-Br)\chi_0=0$$

(1) 现在对上述方程作量纲分析

$$[B]=[E][L]^{-1},\qquad [\hbar]=[E]^{1/2}[L][m]^{1/2}$$

$$[E]^{3/2}=[B\hbar][m]^{-1/2}$$

$$E=f(n)(B\hbar)^{2/3}(\mu)^{-1/3}$$

$f(n)$是仅与主量子数n有关的无量纲常数，则

$$\Delta E_\psi=E_{\psi'}-E_\psi=f(1)\frac{(B\hbar)^{2/3}}{\mu_c^{1/3}}-f(0)\frac{(B\hbar)^{2/3}}{\mu_c^{1/3}}$$

$$=\frac{(B\hbar)^{2/3}}{\mu_c^{1/3}}(f(1)-f(0))$$

同理

$$\Delta E_\gamma=\frac{(B\hbar)^{2/3}}{\mu_b^{1/3}}(f(1)-f(0))$$

则

$$\frac{\Delta E_r}{\Delta E_\psi}=\left(\frac{\mu_c}{\mu_b}\right)^{1/3}=\left(\frac{1}{3}\right)^{1/3}$$

$$E_{r'}-E_r\approx 0.42\text{GeV}$$

$$E_{r'}=E_r+0.42=9.5+0.42\approx 9.9(\text{GeV})$$

(2) 由方程(1)，用 W.K.B 近似法可得出 Bohr-Sommerfeld 量子化定则

$$2\int_0^a\sqrt{2\mu(E_R-A-Br)}\mathrm{d}r=(n+\frac{3}{4})\hbar,\qquad a=\frac{E_R-A}{B}$$

得

$$E_n=A+\frac{\left[3\left(n+\dfrac{3}{4}\right)B\hbar/4\right]^{2/3}}{(2\mu)^{1/3}}$$

由此求得

$$E_{\psi'}-E_\psi=\frac{(B\hbar)^{2/3}}{(2\mu_e)^{1/3}}\left[\left(\frac{21}{16}\right)^{2/3}-\left(\frac{9}{16}\right)^{2/3}\right]$$

$$E_{\psi''}-E_{\psi'}=\frac{(B\hbar)^{2/3}}{(2\mu_e)^{1/3}}\left[\left(\frac{33}{16}\right)^{2/3}-\left(\frac{21}{16}\right)^{2/3}\right]$$

$$\frac{E_{\psi''}-E_{\psi'}}{E_{\psi'}-E_\psi}=\frac{(33)^{2/3}-(21)^{2/3}}{(21)^{2/3}-(9)^{2/3}}\approx 0.81$$

$$E_{\psi''}-E_{\psi'}=0.81\times(E_{\psi'}-E_\psi)=0.81\times(3.7-3.1)\approx 0.49(\text{GeV})$$

$$E_{\psi''}=3.7+0.49\approx 4.2(\text{GeV})$$

3.19 质子和中子通过交换 $\pi^\pm$ 介子产生近似的吸引势 $V(r)=-\dfrac{g^2}{d}\mathrm{e}^{-r/d}$

题 3.19 两个质量各为 M 的粒子通过势

$$V(r)=-\frac{g^2}{d}\mathrm{e}^{-r/d}$$

互相吸引，其中 $d=\hbar/mc$，且 $mc^2=140\text{MeV}, Mc^2=940\text{MeV}$. (1) 证明：只要适当选取参数 α 和 β，则通过变量代换 $x=\alpha\mathrm{e}^{-\beta r}$，可以将该体系 $l=0$ 时的径向 Schrödinger 方程化成 Bessel 方程

$$\frac{\mathrm{d}^2J_\rho(x)}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{x}\cdot\frac{\mathrm{d}J_\rho(x)}{\mathrm{d}x}+\left(1-\frac{\rho^2}{x^2}\right)J_\rho(x)=0$$

(2) 假设已知该体系只有一个束缚态，结合能为 2.2MeV，计算 $g^2/\hbar c$ 的数值并指出其单位. (注　试题开头已给出 $J_\rho(x)$ 的数值图，见题图 3.19). (3) 为使该体系具有两个 $l=0$ 的束缚态，$g^2/\hbar c$ 的最小值应等于多少 (d 和 M 不变)?

解　(1) $l=0$ 时，径向波函数 $R(r)=\chi(r)/r$ 满足的方程为(约化质量 $\mu=M/2$)

题图 3.19

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi(r)}{\mathrm{d}r^2}+\frac{M}{\hbar^2}\left(E+\frac{g^2}{d}\mathrm{e}^{-r/d}\right)\chi(r)=0$$

如果作变量代换

$$r\to x=\alpha\mathrm{e}^{-\beta r},\qquad \chi\in[0,\alpha]$$

并记 $\chi(r)=J(x)$，则

$$\frac{\mathrm{d}^2J(x)}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{x}\cdot\frac{\mathrm{d}J(x)}{\mathrm{d}x}+\left[\frac{Mg^2}{\hbar^2d\beta^2}\left(\frac{x}{\alpha}\right)^{\frac{1}{\alpha\beta}}\frac{1}{x^2}+\frac{ME}{\hbar^2\beta^2}\cdot\frac{1}{x^2}\right]J(x)=0$$

若令

$$\alpha=\frac{2g}{\hbar}\sqrt{Md},\qquad \beta=\frac{1}{2d}$$

并记

$$\rho^2=\frac{4d^2M|E|}{\hbar^2}=-\frac{4d^2ME}{\hbar^2}$$

则径向 Schrödinger 方程化成 ρ 阶 Bessel 方程

$$\frac{d^2 J_\rho(x)}{dx^2} + \frac{1}{x} \cdot \frac{dJ_\rho(x)}{dx} + \left(1 - \frac{\rho^2}{x^2}\right) J_\rho(x) = 0$$

(2) 对于束缚态，要求 $r \to \infty$ 时，$R(r) \to 0$. 满足该条件的解为(不考虑归一化)

$$\chi(r) = J_\rho(\alpha e^{-\beta r}), \qquad \rho \geqslant 0$$

另一方面，必须有 $\chi(0) = 0$，这给出

$$J_\rho(\alpha) = 0$$

现在已知

$$\rho = \frac{2d}{\hbar}\sqrt{M|E|} = \frac{2}{mc^2}\sqrt{Mc^2|E|} = \frac{2}{140}\sqrt{940 \times 2.2} \approx 0.6$$

根据题图 3.19，可以近似求出 $\rho = 0.6$ 时函数 $J_\rho(x)$ 的最小零点值为 3.3，这也就是给出只具有一个束缚态的势阱的 α 值

$$\alpha \approx 3.3$$

于是，容易求出

$$\frac{g^2}{\hbar c} = \frac{\hbar \alpha^2}{4Mcd} = \frac{mc^2 \alpha^2}{4Mc^2} = \frac{140 \times (3.3)^2}{4 \times 940} \approx 0.4$$

这是一个无量纲数.

(3) 考察题图 3.11，不难发现当 $\alpha < 5.5$ 时，给定 α 值，只能求出一个 $\rho(>0)$，使得 $J_\rho(\alpha) = 0$，这时无论如何只能给出一个束缚态. 因此，要得到两个 $l = 0$ 的束缚态，必须 $\alpha \geqslant 5.5$，于是 $g^2/\hbar c$ 的最小值为

$$\left(\frac{g^2}{\hbar c}\right)_{\min} = \frac{mc^2 \alpha_{\min}^2}{4Mc} = \frac{140 \times (5.5)^2}{4 \times 940} \approx 1.1$$

3.20　中心力场束缚态的一个重要关系

题 3.20　证明在非相对论量子力学中，对于中心势场 $V(r)$ 中的任何单粒子束缚态有下列关系式成立

$$|\psi(0)|^2 = \frac{m}{2\pi}\left\langle \frac{dV(r)}{dr} \right\rangle - \frac{1}{2\pi}\left\langle \frac{L^2}{r^3} \right\rangle$$

其中 $\psi(0)$ 是原点波函数，$V(r)$ 为势能，m 为粒子质量，L^2 为角动量平方(令 $\hbar = 1$). 在角动量不为零的情形下给出方程的经典解释.

证明　在中心力场下

$$-\frac{1}{2m}\left[\frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{L^2}{r^2}\right]\psi + V(r)\psi = E\psi$$

令

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{1}{r} u(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

其中 $u(r) = rR(r)$，得

$$u''+\left[2m(E-V(r))-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]u=0,\qquad r>0 \tag{1}$$

式(1)两边乘以$u'(r)$，并对r积分，得

$$\int u'(r)u''(r)\mathrm{d}r+\int\left[2m(E-V(r))-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\cdot\left(\frac{1}{2}u^2(r)\right)\mathrm{d}x=0$$

分部积分之，并利用$u'(\infty)=0,u(\infty)=u(0)=0$

$$u'(0)=\left[R(r)+rR'(r)\right]_{r=0}=R(0)$$

得

$$-\frac{1}{2}R^2(0)+\frac{1}{2}\left[2m\int R^2\frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}r^2\mathrm{d}r-\int\frac{2l(l+1)}{r^3}R^2r^2\mathrm{d}r\right]=0$$

所以

$$\begin{aligned}|\psi(0)|^2&=\frac{1}{4\pi}R^2(0)\\&=\frac{m}{2\pi}\int|R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2\frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}r^2\mathrm{d}r\mathrm{d}\Omega\\&\quad-\frac{1}{2\pi}\int[R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)]\frac{L^2}{r^3}[R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)]\cdot r^2\mathrm{d}r\mathrm{d}\Omega\end{aligned}$$

即

$$|\psi(0)|^2=\frac{m}{2\pi}\left(\frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}\right)-\frac{1}{2\pi}\left(\frac{L^2}{r^3}\right)$$

$l\neq0$时，$|\psi(0)|^2=0$，所以

$$\left\langle\frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}\right\rangle=\frac{1}{m}\left\langle\frac{L^2}{r^3}\right\rangle$$

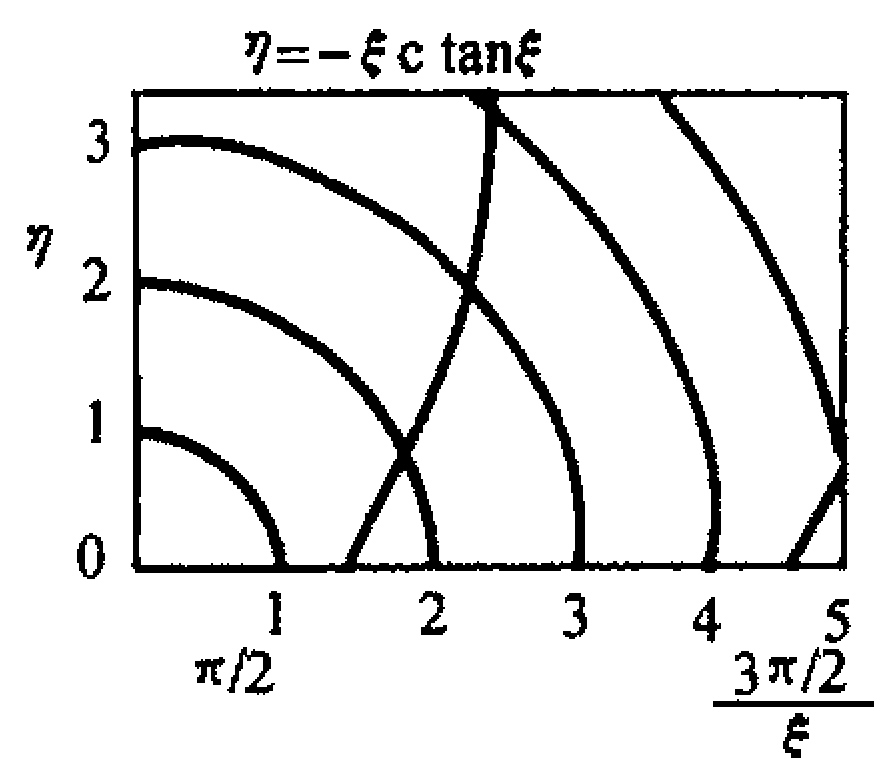
其经典对应为

$$\frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}=\frac{1}{m}\cdot\frac{L^2}{r^3} \tag{2}$$

而$\dfrac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}=-F_r$，为向心力

$$\frac{1}{m}\cdot\frac{L^2}{r^3}=m\frac{|\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{v}|^2}{r^3}=m\frac{1}{r}(v\sin\langle\boldsymbol{r},\boldsymbol{v}\rangle)^2=m\frac{v_t^2}{r}=ma_r$$

其中v_t为沿球面的切向加速度，$a_r=v_t^2/r$为向心加速度. 可见式(2)正是牛顿第二定律的表达式.



题图 3.21

3.21 有限深球方势阱中的束缚态

题 3.21 一个质量为m的无自旋粒子，约束在一半径为r_0的球方吸引势阱内. (1) 为了获得两个零角动量的束缚态，势阱的最小深度为多少？在这个势阱深度下. (2) 属于零角动量的 Hamilton 量本征值为多少(如果需要，你可以将你的部分解答表成超越方程之解)？

如果粒子处于基态，(3) 在坐标基下画出波函数和与之相应的概率分布. 详细解释后者的物理意义. (4) 用这一波函数预言对粒子动能的单次测量的结果，可以将之表示成一维定积分的形式. (5) 在不确定性原理基础上，给出(3)和(4)联系的定性分析.

解　(1) 径向波函数 $R(r)=\chi(r)/r$ 满足方程 $(l=0)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}r^2}-V_0\chi=E\chi,\qquad 0<r<r_0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}r^2}=E\chi,\qquad r_0<r<\infty$$

$$\chi(0)=0,\qquad \chi(\infty)\text{有限}$$

于是，波函数应取

$$\chi(r)=\begin{cases}\sin\alpha r, & 0\leqslant r\leqslant r_0, \quad \alpha^2=2m(V_0+E)/\hbar^2\\ B\mathrm{e}^{-\beta r}, & r_0<r<\infty, \quad \beta^2=2m|E|/\hbar^2\end{cases}$$

由 $r=r_0$ 处的边界条件得出

$$-\alpha\cot\alpha r_0=\beta$$

令 $\xi=\alpha r_0,\eta=\beta r_0$，则得出

$$\xi^2+\eta^2=2mV_0r_0^2/\hbar^2$$

$$-\xi\cot\xi=\eta$$

由题图 3.21 可以看出，要有两个束缚态的最小势阱深度为

$$\frac{2mV_0r_0^2}{\hbar^2}\geqslant\left(\frac{3\pi}{2}\right)^2$$

$$(V_0)_{\min}=\frac{9\pi^2\hbar^2}{8mr_0^2}$$

(2) 在(1)中的势阱深度下所求 Hamilton 量的本征值为

$$E_2=0$$

而基态能量 E_1 满足方程

$$\begin{cases}-\dfrac{1}{r_0}\left(\dfrac{3\pi}{2}\right)\sqrt{1-\left(\dfrac{2\beta r_0}{3\pi}\right)^2}\cot\dfrac{3\pi}{2}\sqrt{1-\left(\dfrac{2\beta r_0}{3\pi}\right)^2}=\beta\\ E_1=-\dfrac{\beta^2\hbar^2}{2m}\end{cases}$$

(3) 归一化后的基态波函数为

$$\chi(r)=\begin{cases}A\sin\alpha r, & 0\leqslant r\leqslant r_0\\ A\sin\alpha r_0\cdot\mathrm{e}^{\beta(r_0-r)}, & r>r_0\end{cases}$$

归一化常数为

$$\frac{1}{A^2}=\frac{1}{2\alpha}(\alpha r_0-\sin\alpha r_0\cos\alpha r_0)+\frac{1}{2\beta}\sin^2\alpha r_0$$

而 α,β 的意义已在(1)、(2)中给出，其波函数与概率分布如题图 3.21′(a)与图 3.21′(b)所示.

从题图 3.21′中可以看出，粒子在 $r<r_0$ 区域中的概率很大，在 r_0 外指数衰减，故可认为粒子被束缚在此球方阱中.

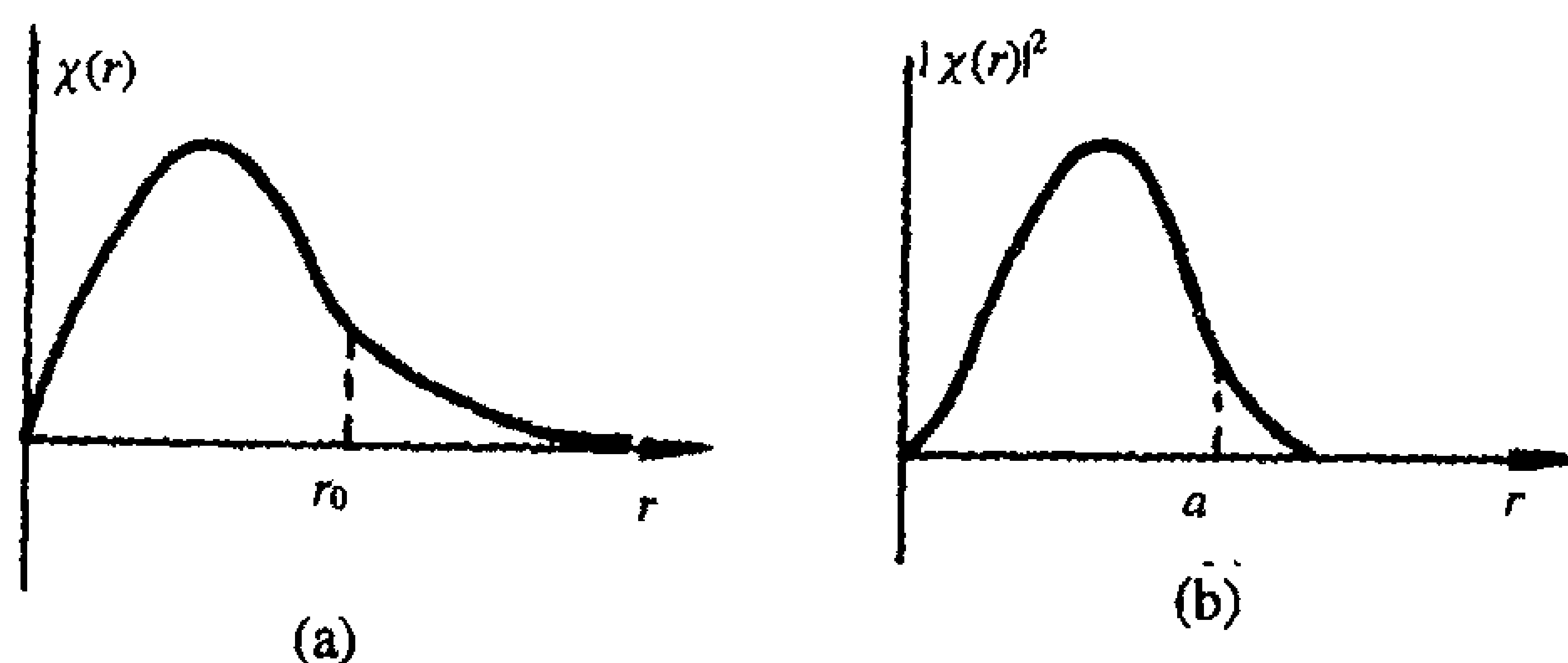
(4) 粒子动能 $E_r=\dfrac{p^2}{2m}$ 是动量 p 的函数，故对粒子动能的测量概率等同于对动量 p 的测量概率 $|\psi(p)|^2$. 这里 $\psi(p)$ 是基态坐标波函数的 Fourier 变换，而 $\psi(p)$ 是它对方向作 4π 积分.

$$
\begin{aligned}
|\psi(p)|^2=|\psi(p)|^2&=\left|\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\cdot\int\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\cdot\frac{\chi(r)}{x}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p\cdot r/\hbar}\mathrm{d}r\right|^2\\
&=\frac{1}{4\pi(2\pi\hbar)^3}\left|\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi}\frac{\chi(r)}{r}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}pr\cos\theta/\hbar}\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi\cdot r^2\mathrm{d}r\right|^2\\
&=\frac{1}{2\pi^2\hbar^2}\left|\int_0^\infty\frac{\chi(r)}{r}\cdot\frac{\sin\left(\frac{pr}{\hbar}\right)}{\left(\frac{pr}{\hbar}\right)}r^2\mathrm{d}r\right|^2
\end{aligned}
$$

代入(3)中的 $\chi(r)$ 表达式即可积出.

平均动能数值 $\overline{E_r}$ 为

$$
\begin{aligned}
\overline{E_r}&=\langle\psi_1|\frac{p^2}{2m}|\psi_1\rangle=E_1-\langle\psi_1|V|\psi_1\rangle\\
&=E_1+V_0\int_0^{r_0}A^2\sin^2\alpha r\cdot\frac{1}{r^2}\cdot r^2\mathrm{d}r\cdot4\pi\\
&=E_1+2\pi V_0A^2\left(r_0-\frac{\sin2\alpha r_0}{2\alpha}\right)
\end{aligned}
$$



题图 3.21′

(5) 由上述讨论可知，(3)中的空间波函数给出了空间的概率分布，而(4)中 p 空间波函数给出了动量的概率分布，这两者弥散特征量之积应满足不确定性原理

$$\Delta p\Delta r\geqslant\hbar/2$$

即两者的“胖瘦”应该是互补的.

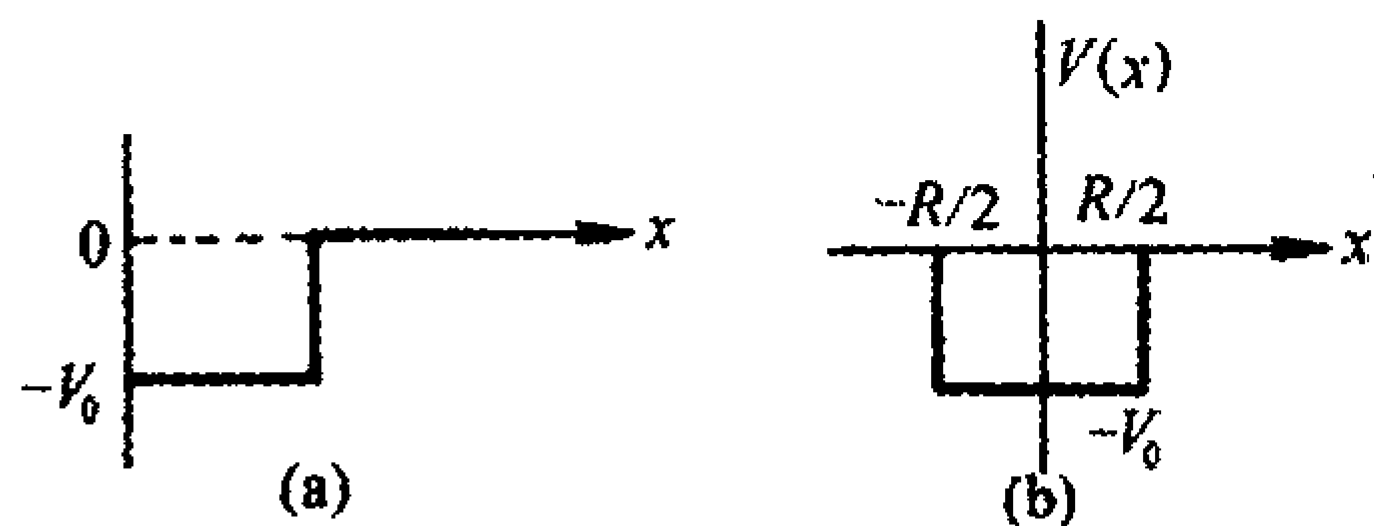
3.22 有限深球方势阱存在束缚态的条件

题 3.22 (1) 一个质量为 m 的粒子在一个三维方势阱 $V(|r|)$ 中运动. 证明：对于一个半径 R 一定的阱，只有其阱深起码有一极小值时，才可能有束缚态存在(题图 3.22(a)). 计算此极小值. (2) 在一维中的一个类似问题有不同结果. 这一结果是什么(题图 3.22(b))?

(3) 你能证明(1)、(2)结果中的一般性质对任意形状的势阱均成立吗？例如，在一维情况(2)中

$$V(x)=\lambda f(x)<0,\qquad a\leqslant x\leqslant b$$
$$V(x)=0,\qquad x<a \text{ 或 } x>b$$

保持$f(x)$不变，讨论不同的λ值.



题图 3.22

解　(1) 假定存在一束缚态$\psi(r)$，并假定它为基态$(l=0)$，$\psi(r)=\psi(r)$. 本征方程为$(E<0)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{1}{r^2}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\psi(r)\right)+V(r)\psi(r)=E\psi(r)$$

如图 3.6(a) 所示

$$V(r)=\begin{cases}0, & r>R\\ -V_0, & 0<r<R\end{cases}$$

解得

$$\psi(r)=\begin{cases}A\dfrac{\sin kr}{r}, & r<R, \quad k=\sqrt{\dfrac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}\\ B\dfrac{\mathrm{e}^{-k'\cdot r}}{r}, & r>R, \quad k'=\sqrt{\dfrac{-2mE}{\hbar^2}}\end{cases}$$

A、B是归一化常数，利用在$r=R$处的边界条件

$$\left[\ln(r\psi(r))\right]'\Big|_{r=R^-}=\left[\ln(r\psi(r))\right]'\Big|_{r=R^+}$$

得到

$$V_0\geqslant\frac{\pi^2\hbar^2}{8mR^2}$$

(2) 在一维方势阱时，不论阱深如何，总有一束缚态存在. 束缚基态对原点总是对称的(取阱的中心为原点)，本征方程为

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-V(x)\right]\psi(x)=0$$

如题图 3.22(b) 所示

$$V(x)=\begin{cases}-V_0, & |x|<\dfrac{R}{2}\\ 0, & |x|>\dfrac{R}{2}\end{cases}$$

注意到$\psi(x)=\psi(-x)$,解之可得

$$\psi(x)=\begin{cases}A\cos(kx), & |x|<\dfrac{R}{2}\\ B\mathrm{e}^{-k'|x|} & |x|>\dfrac{R}{2}\end{cases}$$

利用与(1)中同样的边界条件，有

$$\tan\left(\frac{kR}{2}\right)=\frac{k'}{k}$$

得

$$\sec^2\left(\frac{kR}{2}\right)=\frac{1}{k^2}\cdot\frac{2mV_0}{\hbar^2}$$

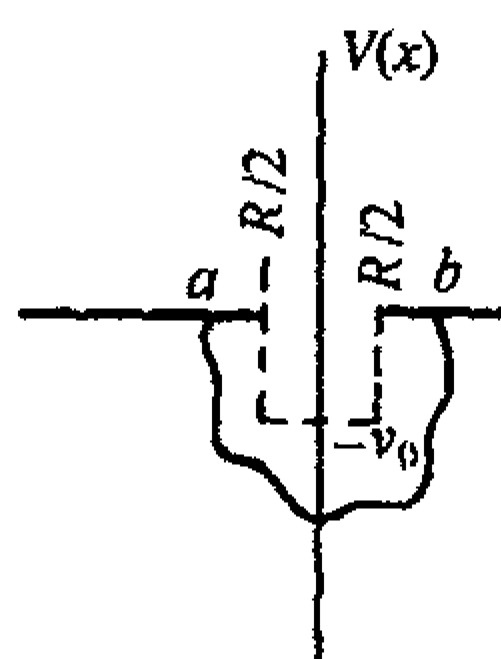
从而有

$$\cos\left(\frac{kR}{2}\right)=\pm\frac{k}{\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}}$$

对任何 V_0 均有解存在.

(3) 对一维情况，定义一个方势阱 V_s，使之满足

$$V_s(x)\equiv\begin{cases}-V_0, & |x|<\dfrac{R}{2}\\ 0, & |x|>\dfrac{R}{2}\end{cases}$$



题图 3.22′

且 $-V_0>V(x)$ 对任何 x 均成立(题图 3.22′). 从(2)中可知存在一个 $|\psi_0(x)\rangle$，是与 $V_s(x)$ 相应的本征束缚态，即

$$\langle\psi_0|\frac{p^2}{2m}+V_s(x)|\psi_0\rangle<0$$

但是

$$\langle\psi_0|\frac{p^2}{2m}+V(x)|\psi_0\rangle<\langle\psi_0|\frac{p^2}{2m}+V_s(x)|\psi_0\rangle$$

所以

$$\langle\psi_0|\frac{p^2}{2m}+V(x)|\psi_0\rangle<0$$

即题中所给的 $V(x)$ 形式的阱均有束缚态(对其他形式的 $V(x)$，可能没有束缚态).

3.23　在势 $V(x,y,z)=\begin{cases}\infty, & x\leqslant 0,\quad y,z\text{ 任意}\\ 0, & x>0,\quad y,z\text{ 任意}\end{cases}$ 中运动的粒子，计算其 Green 函数及 $|G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',t)|^2$

题 3.23　对于在势

$$V(x,y,z)=\begin{cases}\infty, & x\leqslant 0,\quad y,z\text{ 任意}\\ 0, & x>0,\quad y,z\text{ 任意}\end{cases}$$

中运动的非相对论电子，计算其 Green 函数及 $|G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',t)|^2$，描述概率随时间的演变并给以物理解释.

解　本题的势可用 $x=0$ 处 $G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',t)=0$ 的边界条件替代，而这一边值问题可由镜像法求解. 设 $\boldsymbol{r}''$ 为 $\boldsymbol{r}'$ 关于 $x=0$ 的镜像

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-H\right)G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',t)=\delta(t)\left[\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')-\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'')\right] \tag{1}$$

这一方程的解的 $x>0$ 部分就是真实的 Green 函数的 $x>0$ 部分，而后者在 $x\leqslant 0$ 时为零，令

$$G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',t)=\frac{1}{(2\pi)^4}\int\mathrm{d}^3k\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\omega\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\mathrm{i}\omega t}\overline{G}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{r}',\omega) \tag{2}$$

代入式(1)，可得

$$\overline{G}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{r}',\omega)=\frac{1}{\hbar\omega-\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}}\left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}''}\right]$$

代回式(2)，得

$$G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',t)=\frac{1}{(2\pi)^4}\int\mathrm{d}^3k\mathrm{d}\omega\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\mathrm{i}\omega t}\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}''}}{\hbar\omega-\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}}$$

先对 ω 积分，考虑到因果性要求，当 $t<0$ 时，$G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',t)=0$，我们使 ω 的极点作一移动 $-\mathrm{i}\varepsilon$，ε 为一小正数，最后令 $\varepsilon\to 0$. 得到

$$\begin{aligned}G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',t)&=\frac{-\mathrm{i}}{\hbar(2\pi)^3}\int\mathrm{d}^3k\exp\left(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\mathrm{i}\frac{\hbar k^2}{2m}t\right)\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}''}\right)\\&=\frac{1}{\hbar}\left[\frac{m}{2\pi\hbar t}\right]^{3/2}\left\{\exp\left[\frac{\mathrm{i}m(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')^2}{2\hbar t}\right]-\exp\left[\frac{\mathrm{i}m(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'')^2}{2\hbar t}\right]\right\}\end{aligned} \tag{3}$$

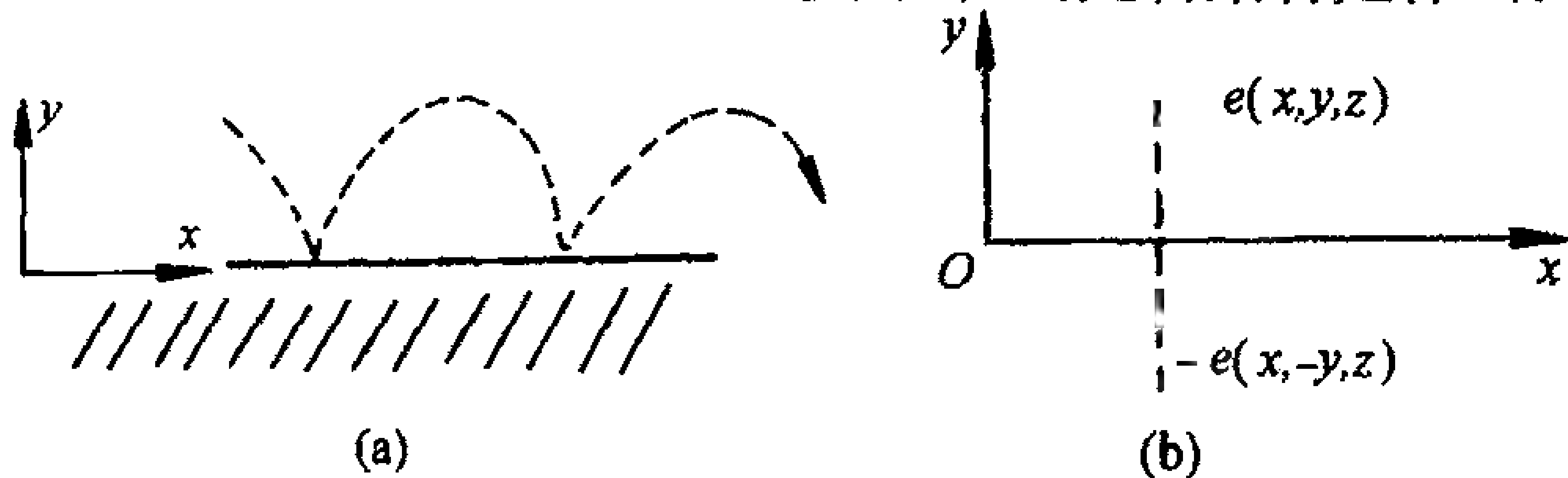
所以，当 x,t 同时大于零时，Green 函数由式(3)给出，否则为零. 在 $x>0,t>0$ 时

$$\left|G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',t)\right|^2=\frac{1}{\hbar^2}\left[\frac{m}{2\pi\hbar t}\right]^3\left\{2-2\mathrm{Re}\left\{\exp\left(\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar t}\left[\boldsymbol{r}'^2-\boldsymbol{r}''^2-2\boldsymbol{r}\cdot(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}'')\right]\right)\right\}\right\}$$

如果没有势 $V(x,y,z)$，则自由空间的 Green 函数 $\left|G_0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',t)\right|^2$ 比例于 t^{-3}. 现在由于反射壁的存在，因而出现了干涉项.

3.24　电子在不可穿入的导体表面上方的运动

题 3.24　一电子在一不可穿入的导体表面上方运动. 它被自身的像电荷吸向表面，因而经典地说它沿表面跳跃. 如题图 3.24(a)所示. (1) 写出该电子的能量本征值和能量本征函数所满足的 Schrödinger 方程. 忽略像电荷的惯性效应. (2) 本征态与 x, z 的依赖关系是什么？(3) 所保持的边界条件是什么？(4) 求出基态和它的能量(**提示**　它们与氢原子的基态及能量形成紧密相关). (5) 分立和/或连续能量本征值的完备集合是什么？



题图 3.24

解 (1) 如题图 3.24(b)所示，系统电能 $V(r)=\frac{1}{2}\sum_i q_iV_i=-e^2/4y$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2-\frac{e^2}{4y}\right)\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z)$$

(2) 对上述方程进行分离变量

$$\psi(x,y,z)=\psi_n(y)\psi(x,z)$$

$$\psi(x,z)=\frac{1}{2\pi\hbar}\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p_xx+p_zz)\right]$$

(3) 边界条件

$$\psi(x,y,z)=0,\qquad y\leqslant 0$$

(4) 分离变量后，Schrödinger 方程化为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2\psi_n(y)}{\mathrm{d}y^2}-\frac{e^2}{4y}\psi_n(y)=E\psi_n(y)\tag{1}$$

氢原子径向 Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{1}{r^2}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\right)-\frac{e^2}{r}R+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\cdot R=ER$$

令 $R=\frac{1}{r}\chi(r)$，则对于 $l=0$ 有

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}r^2}-\frac{e^2}{r}\chi=E\chi\tag{2}$$

比较式(1)，式(2)，则基态波函数为

$$\psi_1(y)=y\cdot R_{10}(y)=y\cdot\frac{1}{a'^{3/2}}\mathrm{e}^{-y/a'}$$

$$=2y\left(\frac{me^2}{4\hbar^2}\right)^{3/2}\exp\left(-\frac{me^2y}{4\hbar^2}\right),\qquad a'=\frac{4\hbar^2}{me^2}$$

基态能量为

$$E_{1,0,0}=-me^4/32\hbar^2$$

可见这里 $y=a'=4\hbar^2/me^2=4a_0$（a_0 为 Bohr 半径），表示电子基态最大概率之所在.

(5) 能量完备集为

$$E_{n,p_x,p_z}=-\frac{me^4}{32\hbar^2n^2}+\frac{1}{2m}\left(p_x^2+p_y^2\right)$$

波函数为

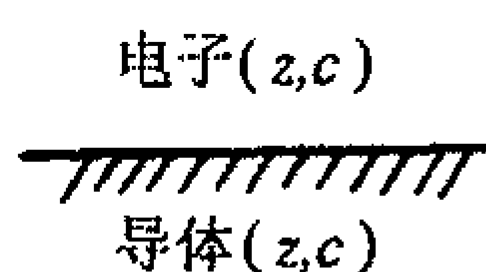
$$\psi_{n,p_x,p_y}(\boldsymbol{r})=cyR_{n0}(y)\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(p_xx+p_zz\right)\right]$$

c 为归一化常数.

3.25 非相对论电子在无限大接地、不可穿透导体上方的运动

题 3.25 一非相对论电子在一无限大的接地平面导体的上方运动(题图 3.25)，它被自

己的像电荷所吸引，但电子不能穿透导体表面. (1) 写出电子波函数所满足的边界条件. (2) 求出电子的能级. (3) 对基态，求出电子与导体表面之间的平均距离.



题图 3.25

解　(1)

$$H=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2-\frac{e^2}{4z}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)-\frac{e^2}{4z}$$

电子波函数需满足

$$\psi(x,y,z)=0,\qquad z\leqslant 0$$

(2)

$$E=\frac{1}{2\mu}\left(p_x^2+p_y^2\right)+E_{zn},\qquad E_{zn}=-\frac{e^2}{8a'}\cdot\frac{1}{n^2}$$

$$E=\frac{1}{2\mu}\left(p_x^2+p_y^2\right)-\frac{\mu e^4}{32\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2}$$

(3) 基态能量为 $E=\dfrac{-\mu e^4}{32\hbar^2}$，$a'=\dfrac{\hbar^2}{\mu e'^2}\left(e'^2=\dfrac{e^2}{4}\right)$，$\psi_{100}(x,y,z)=\dfrac{2z}{a'^{3/2}}\mathrm{e}^{-z/a'}$

$$\langle 0|z|0\rangle=\int\mathrm{d}x^3\psi_{100}^*\psi_{100}z=\frac{4}{a'^3}\int_0^\infty z^3\mathrm{e}^{-2z/a'}\mathrm{d}z=\frac{3}{2}a'=\frac{6\hbar^2}{\mu e^2}$$

3.26　粒子在势场 $V(r)=-\dfrac{\lambda}{r^{2/3}}$ 中运动，由不确定性关系估计其基态能

题 3.26　质量为 m 的粒子在势场 $V(r)=-\lambda/r^{3/2}$ 中运动，用不确定性关系估算其基态能量.

解　在中心势场中，基态波函数仅是 r 的函数，$\bar{r}=\bar{p}=0$，故有 $\overline{p^2}=(\Delta p)^2$，$\bar{r}^2=(\Delta r)^2$. 由不确定性关系 $\Delta p\cdot\Delta r\geqslant\dfrac{\hbar}{2}$，得

$$\overline{H}=\frac{\overline{p^2}}{2m}-\lambda\overline{r^{-3/2}}\geqslant\frac{(\Delta p)^2}{2m}-\lambda\left(\frac{\Delta p}{\hbar/2}\right)^{3/2}$$

求能量的极值点得到

$$\frac{\delta\overline{H}}{\delta(\Delta p)}=0$$

$$\Rightarrow\Delta p=\frac{(3m\lambda/2)^2}{(\hbar/2)^3}$$

$$\Rightarrow\overline{H}=-\frac{27}{32}\frac{m^3\lambda^4}{\hbar^6}$$

3.27　粒子在球势阱 $V(r)=-\gamma\delta(r-a)$ 中运动

题 3.27　质量为 μ 的粒子在球势阱 $V(r)=-\gamma\delta(r-a)(\gamma,a>0)$，中运动，求存在束缚态的条件.

解 束缚态为基态时 $(l=0)$，给出此条件，令 $\chi=r\psi$，Schrödinger 方程

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\frac{2\mu\gamma}{\hbar^2}\delta(r-a)+\frac{2\mu E}{\hbar^2}\right)\chi=0$$

波函数的边界条件是 $\chi(0)=\chi(\infty)=0$. 因为 $V(r>0)\leqslant 0$, 所以束缚态 $E<0$.

可令 $k=\sqrt{-\frac{2\mu E}{\hbar^2}}$，Schrödinger 方程改写成

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}\chi(r)+\frac{2\mu\gamma}{\hbar^2}\delta(r-a)\chi(r)-k^2\chi(r)=0 \tag{1}$$

在 $(a-\varepsilon,a+\varepsilon)$ 区域积分式(1) $(\varepsilon\to 0)$，可得另一边界条件

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\chi'(a+\varepsilon)-\chi'(a-\varepsilon)=-\frac{2\mu\gamma}{\hbar^2}\chi(a)$$

即

$$\left.\frac{\chi'}{\chi}\right|_{r=a-0}^{r=a+0}=-\frac{2\mu\gamma}{\hbar^2} \tag{2}$$

在 $r\neq a$ 处，方程为

$$\chi''-k^2\chi=0$$

此方程的解为

$$\begin{cases}\chi=c_1\mathrm{e}^{-kr}, & r>a\\ \chi=c_2\sinh kr, & r<a\end{cases} \tag{3}$$

将式(3)代入式(2)，可得

$$-k-k\coth ka=-\frac{2\mu\gamma}{\hbar^2} \tag{4}$$

如 V_0 之值刚够形成第一个束缚态，能级必为 $E=0^-$，这时 $k\sim 0$, $\coth ka\sim\frac{1}{ka}$.

代入式(4)，有

$$-\frac{1}{a}=-\frac{2\mu\gamma}{\hbar^2}$$

$$l'=-\frac{1}{2}+\left(l+\frac{1}{2}\right)\left[1+\frac{4\lambda}{(2l+1)^2}\right]^{1/2}$$

方程化为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}\chi+\left[l'(l'+1)\frac{\hbar^2}{2mr^2}-\frac{a}{r}\right]\chi=E\chi$$

相当于氢原子径向方程中 l 换成 l'，e^2 换成 a. 由氢原子的能级

$$E_n=-\frac{e^2}{2n^2a_0},\qquad n=n_r+l+1$$

$$a_0=\frac{\hbar^2}{me^2},\qquad n_r=0,1,2,\cdots$$

得到本题的解

$$E_{nl'}=-\frac{ma^2}{2(n')^2\hbar^2},\qquad n'=n_r+l'+1$$

3.28　$V(r)=-\frac{a}{r}+\frac{A}{r^2}$，$(a,A>0)$，粒子的能量本征态

题 3.28　设$V(r)=-\frac{a}{r}+\frac{A}{r^2},(a,A>0)$. 求粒子能量本征值.

解　取守恒量完全集为(H,L^2,L_z)，其共同本征函数为

$$\psi(r,\theta,\varphi)=R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{\chi(r)}{r}Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$\chi(r)$满足的径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}\chi+\left[l(l+1)\frac{\hbar^2}{2mr^2}-\frac{a}{r}+\frac{A}{r^2}\right]\chi=E\chi$$

令$\lambda=\frac{2mA}{\hbar^2}$

$$l'(l'+1)=l(l+1)+\lambda$$

3.29　三维各向同性谐振子与Coulomb场束缚态径向方程的联系

题 3.29　试将三维各向同性谐振子的径向方程和Coulomb场中束缚态的径向方程联系起来，并利用后者的本征解得出前者的本征解.

解　谐振子势场为

$$V(r)=\lambda r^2,\qquad \lambda>0$$

(H,L^2,L_z)的共同本征态可以表示为

$$\psi=R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{1}{r}\chi(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$\chi(r)$满足径向方程

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}r^2}+\left[E-\lambda r^2-l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right]\chi=0\tag{1}$$

Coulomb吸引场为

$$V(r)=\frac{\lambda'}{r},\qquad \lambda'<0$$

(H,L^2,L_z)的共同本征态可以表示为

$$\psi=\frac{1}{r}u(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$u(r)$满足径向方程

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}+\left[E'-\frac{\lambda'}{r}-l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u=0\tag{2}$$

如对式(1)作变换

$$r^2=\rho,\qquad x(r)=\rho^{-1/4}v(\rho) \tag{3}$$

可得 $v(\rho)$ 满足径向方程

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{\mathrm{d}^2v}{\mathrm{d}\rho^2}+\left[E''-\frac{\lambda''}{\rho}-l'(l'+1)\frac{\hbar^2}{2\mu\rho^2}\right]v=0 \tag{4}$$

其中

$$E''=-\lambda/4<0,\qquad \lambda''=-E/4<0 \tag{5}$$

$$l'(l'+1)=\frac{1}{4}l(l+1)-\frac{3}{16} \tag{6}$$

式(6)亦即

$$l'=\frac{l}{2}-\frac{1}{4} \tag{7}$$

式(4)和式(2)构造相同，其间对应关系为

$$u-v,\qquad r-\rho,\qquad l-l',\qquad E'-E'',\qquad \lambda'-\lambda''$$

众所周知，式(2)的本征解(束缚态，$E'<0$)为

$$E'=-\frac{\mu}{2\hbar^2}(\lambda')^2(n_r+l+1)^{-2},\qquad n_r=0,1,2,\cdots$$

$$u(r)=r^{l+1}F\left(-n_r,2l+2,\frac{2\mu|\lambda'|r}{(n_r+l+1)\hbar^2}\right)\mathrm{e}^{-\mu|\lambda'|r/(n_r+l+1)\hbar^2} \tag{8}$$

因此，式(4)的本征解为

$$E'=-\frac{\mu}{2\hbar^2}(\lambda'')^2(n_r+l'+1)^{-2},\qquad n_r=0,1,2,\cdots \tag{9}$$

$$v(\rho)=\rho^{l'+1}F\left(-n_r,2l'+2,\frac{2\mu|\lambda''|\rho}{(n_r+l+1)\hbar^2}\right)\mathrm{e}^{-\mu|\lambda''|\rho/(n_r+l'+1)\hbar^2} \tag{10}$$

式(8)和式(10)中 $F(\alpha,\gamma,z)$ 是合流超几何级数.

将式(5)及式(7)代入式(9)，即得到三维各项同性谐振子的能级公式

$$E=\left(\frac{2\hbar^2\lambda}{\mu}\right)^{1/2}\left(l+2n_r+\frac{3}{2}\right),\qquad n_r=0,1,2,\cdots \tag{11}$$

通常，将谐振子势场写为

$$V(r)=\lambda r^2=\frac{1}{2}\mu\omega^2r^2$$

即 $\lambda=\frac{1}{2}\mu\omega^2$，如再令

$$N=l+2n_r$$

则式(11)可以写为

$$E=\left(N+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega,\qquad N=0,1,2,\cdots$$

将式(10)代入式(3)，则得到谐振子径向波函数为(未归一化)

$$R(r)=\frac{\chi(r)}{r}=r^lF\left(-n_r,l+\frac{3}{2},\frac{\mu\omega}{\hbar}r^2\right)\mathrm{e}^{-\mu\omega r^2/2\hbar} \tag{12}$$

如令 $\alpha=\sqrt{\mu\omega/\hbar}$，式(12)即

$$R(r)=r^l F\left(-n_r, l+\frac{3}{2}, \alpha^2 r^2\right) e^{-\alpha^2 r^2/2}$$

这个结果也可以直接解式(1)而得出.

3.30　$V(r)=\lambda r^\nu$, $-2<\nu<\infty$ 的 $\nu>0$ 和 $\nu<0$ 径向方程的联系

题 3.30　对于幂函数型中心势场

$$V(r)=\lambda r^\nu, \qquad -2<\nu<\infty$$

试找一个变换，将 $\nu>0$ 和 $\nu<0$ 的径向方程联系起来，并加以讨论.

解　(H, L^2, L_z)的共同本征态表示为

$$\psi=R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{1}{r}u(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

径向方程为

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{d^2u}{dr^2}+\left[E-\lambda r^\nu-l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u=0 \tag{1}$$

作变换

$$\rho=r^\alpha, \qquad u(r)=\rho^\beta v(\rho) \tag{2}$$

α,β 待定，利用公式

$$\frac{d}{dr}=\frac{d\rho}{dr}\cdot\frac{d}{d\rho}=\alpha\rho^{1-\frac{1}{\alpha}}\frac{d}{d\rho}$$

容易算出

$$\frac{d^2u}{dr^2}=\alpha^2\rho^{2+\beta-\frac{2}{\alpha}}v''+\alpha^2\left(2\beta+1-\frac{1}{\alpha}\right)\rho^{1+\beta-\frac{2}{\alpha}}v'+\alpha^2\beta\left(\beta-\frac{1}{\alpha}\right)\rho^{\beta-\frac{2}{\alpha}}v$$

取 $\beta=\frac{1}{2}\left(\frac{1}{\alpha}-1\right)$，就可以使 v' 消失. 为此目的，可令

$$\alpha=-\frac{\nu'}{\nu}, \qquad \beta=-\frac{1}{2}\left(1+\frac{\nu'}{\nu}\right) \tag{3}$$

代入式(2)，再代入式(1)，即得

$$\begin{aligned}&\frac{\hbar^2}{2\mu}\rho^{2+\nu'+2\nu'/\nu}v''+\left\{-\lambda\left(\frac{\nu'}{\nu}\right)^2+E\left(\frac{\nu'}{\nu}\right)^2\rho^{\nu'}\right\}v\\&-\frac{\hbar^2}{2\mu}\rho^{-2}\left[l(l+1)\left(\frac{\nu'}{\nu}\right)^2+\frac{1}{4}\left(\frac{\nu'}{\nu}\right)^2-\frac{1}{4}\right]\rho^{2+\nu'+2\nu'/\nu}v=0\end{aligned} \tag{4}$$

如取

$$2+\nu'+2\frac{\nu'}{\nu}=0, \qquad 即 \nu'=-\frac{2\nu}{2+\nu} \tag{5}$$

则式(4)成为

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}v''+\left[E'-\lambda'\rho^{\nu'}-l'(l'+1)\frac{\hbar^2}{2\mu\rho^2}\right]v=0 \tag{6}$$

其中

$$E'=-\lambda\left(\frac{\nu'}{\nu}\right)^2,\qquad \lambda'=-E\left(\frac{\nu'}{\nu}\right)^2,\qquad l'=-\left(l+\frac{1}{2}\right)\frac{\nu'}{\nu}-\frac{1}{2}=\frac{2l+1}{2+\nu}-\frac{1}{2}$$

式(6)和式(1)构造相似，只是ν',λ',E'的正负性质分别与ν,λ,E相反，例如

$$\nu,\lambda,E>0,\qquad \nu',\lambda',E'<0$$

反之亦然，由此可知，$\nu,\lambda>0$时式(1)的本征解，可由式(6)中$\nu',\lambda'<0$的本征解得出. $\nu,\lambda>0$时显然有无限多束缚态能级$(0<E<\infty)$，因此$-2<\nu<0$时也有无限多能级$(E<0)$. 上题就是一个具体实例，而且是能量本征方程可以求解的唯一情形.

根据式(2)、式(3)、式(5)，有

$$\rho=r^{1+\nu/2}$$

当$-2<\nu<\infty$，必有$1+\nu/2>0$，因此

$$r\to 0\text{即}\rho\to 0,\qquad r\to\infty\text{即}\rho\to\infty$$

由式(6)可知

$$\rho\to 0\text{处},\qquad v(\rho)\to\rho^{l'+1}=\rho^{\frac{2l+1}{2+\nu}+\frac{1}{2}}$$

则由式(2)就有

$$r\to 0\text{处},\qquad u(r)\to\rho^{\frac{2l+2}{2+\nu}}=r^{l+1} \tag{7}$$

这个结果可以直接从式(7)得出.

3.31 $V(r)=\lambda r^\nu$, $-2<\nu<\infty$的能级量纲构造式

题 3.31 质量为μ的粒子在中心势场

$$V(r)=\lambda r^\nu,\qquad -2<\nu<\infty$$

中运动. 只讨论能够出现束缚态的情形，即$\lambda\nu>0$的情形. (1) 找出特征长度的量纲构造式，将径向方程无量纲化；(2) 视$\hbar,\mu,\lambda$为参量，确定能级构造和它们的关系；(3) 分别就$\nu=2,1,-1$三种特例作具体讨论.

解 束缚态波函数(H,L^2,L_z的共同本征态)可以表示为

$$\psi=R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{u(r)}{r}Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

径向方程为

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}+\left[E-\lambda r^\nu-l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u=0 \tag{1}$$

方程中各项量纲相同，故特征长度的量纲构造式为

$$r\sim\left(\frac{\hbar^2}{\mu|\lambda|}\right)^{\frac{1}{2+\nu}}$$

特征能量的量纲构造式

$$E \sim \frac{\hbar^2}{\mu r^2} \sim \left(\frac{\hbar^2}{\mu}\right)^{\frac{\nu}{2+\nu}} |\lambda|^{\frac{2}{2+\nu}} \tag{2}$$

据此，引入无量纲的径向距离 ρ 及能量 ε，定义为

$$\rho = r\left(\frac{2\mu|\lambda|}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2+\nu}}$$

$$\varepsilon = E\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(\frac{\hbar^2}{2\mu|\lambda|}\right)^{\frac{2}{2+\nu}} \tag{3}$$

并令

$$u(r) = \omega(\rho)$$

则径向方程(1)变为

$$\frac{\mathrm{d}^2\omega}{\mathrm{d}\rho^2} + \left[\varepsilon - \frac{\lambda}{|\lambda|}\rho^\nu - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]\omega = 0 \tag{4}$$

现在径向方程已经和 $\hbar,\mu,\lambda$ 的数值无关，ε 作为式(4)的特征值，当然与 $\hbar,\mu,\lambda$ 的值无关. 由式(3)易知，任何两个能级之差 ΔE 必然和式(2)具有相同的量纲构造，即

$$\Delta E \propto \left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\right)^{\frac{\nu}{2+\nu}} |\lambda|^{\frac{2}{2+\nu}}$$

由此可见：

① 不论 ν 取什么值 $(\nu > -2)$，如作用强度 $|\lambda|$ 增大，ΔE 亦随之增大.

② 粒子质量 μ 和能级差 ΔE 的依赖关系为

$$\nu > 0, \qquad \mu \text{ 增大时 } \Delta E \text{ 减少}$$

$$\nu < 0, \qquad \mu \text{ 增大时 } \Delta E \text{ 增大}$$

具体来说，$\nu = -1, 2, 1$ 三种特例的规律如下：

甲：Coulomb 势 $(\nu = -1, \lambda < 0)$

$$V(r) = \frac{\lambda}{r}, \qquad \Delta E \propto \frac{\mu\lambda^2}{\hbar^2}$$

事实上，能级公式为

$$E = -\frac{\mu\lambda^2}{2n^2\hbar^2}, \qquad n = 1, 2, 3, \cdots$$

乙：谐振子势 $(\nu = 2, \lambda > 0)$

$$V(r) = \lambda r^2, \qquad \Delta E \propto \hbar\left(\frac{\lambda}{\mu}\right)^{\frac{1}{2}}$$

事实上，能级公式为

$$E_N = \left(N + \frac{3}{2}\right)\left(\frac{2\lambda\hbar^2}{\mu}\right)^{1/2}, \qquad N = 0, 1, 2, \cdots$$

丙：线性中心势 $(\nu = 1, \lambda > 0)$

$$V(r)=\lambda r,\qquad \Delta E\propto\left(\frac{\hbar^2\lambda^2}{\mu}\right)^{1/3}$$

能级公式没有简单表达式. S 态($l=0$)能级的 W. K. B 近似为

$$E_n\approx\left[\frac{3}{2}\pi\left(n+\frac{3}{4}\right)\right]^{\frac{2}{3}}\left(\frac{\hbar^2\lambda^2}{2\omega}\right)^{\frac{1}{3}},\qquad n=0,1,2,\cdots$$

3.32　$V(r)=\lambda r^{\nu}$, $-2<\nu<\infty$ 势场，粒子在半径为 a 的球面内出现的概率

题 3.32　粒子在中心力场中运动，处于束缚态

$$\psi=R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{u(r)}{r}Y_{lm}(\theta,\varphi)\tag{1}$$

径向波函数的归一化条件为

$$\int_0^\infty R^2r^2\mathrm{d}r=\int_0^\infty u^2\mathrm{d}r=1\tag{2}$$

如以原点为球心以给定的半径 a 画一个球面，则粒子在球内出现的概率为

$$P(a)=\int_0^a R^2r^2\mathrm{d}r=\int_0^a u^2\mathrm{d}r$$

如势能为幂函数型

$$V(r)=\lambda r^{\nu},\qquad -2<\nu<\infty$$

试证明：当粒子质量 μ 或作用强度 $|\lambda|$ 增大时，概率 $P(a)$ 只能增大，不会减小.

证明　以 $P(a)$ 和 μ 的关系为例. 令

$$G(a)=\frac{1}{2}\cdot\frac{\partial}{\partial\mu}P(a)=\int_0^\infty u(r)\frac{\partial u(r)}{\partial\mu}\mathrm{d}r\tag{3}$$

需要证明 $G(a)\geqslant 0$.

式(1)中 $u(r)$ 满足径向方程

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}+\left[E-\lambda r^{\nu}-l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u=0\tag{4}$$

按照题 3.31 分析，令

$$\rho=r\left(\frac{2\mu|\lambda|}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2+\nu}},\qquad u(r)=Cw(\rho)\tag{5}$$

$$\varepsilon=E\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(\frac{\hbar^2}{2\mu|\lambda|}\right)^{\frac{2}{2+\nu}}$$

则式(4)就可以无量纲化，变为

$$\frac{\mathrm{d}^2\omega}{\mathrm{d}\rho^2}+\left[\varepsilon-\frac{\lambda}{|\lambda|}\rho^{\nu}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]\omega=0\tag{6}$$

$\omega(\rho)$ 作为方程(6)的特征解和 $\mu,|\lambda|$ 之值没有直接关系. 如令 $\omega(\rho)$ 满足归一化条件

$$\int_0^\infty w^2 \mathrm{d}\rho = 1$$

则利用$u(r)$的归一化条件(2)容易确定式(5)中的归一化常数 C，显然

$$C = \left(\frac{\rho}{r}\right)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{2\mu|\lambda|}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2(2+\nu)}}$$

现在只需计算$\partial u(r)/\partial\mu$，然后代入式(3)，即可证明$G(a) \geqslant 0$

$$\begin{aligned}\frac{\partial u(r)}{\partial\mu} &= \frac{\partial C}{\partial\mu} w(\rho) + c\frac{\partial\rho}{\partial\mu}\cdot\frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}\rho} \\ &= \frac{c}{2(2+\nu)\mu} w(\rho) + \frac{c}{(2+\nu)\mu}\rho\frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}\rho} \\ &= \frac{1}{2(2+\nu)\mu}\left[u(r) + 2r\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}r}\right] \\ &= \frac{1}{2(2+\nu)\mu}\cdot\frac{1}{u(r)}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left[ru^2(r)\right] \end{aligned} \tag{7}$$

代入式(3)，即得

$$G(a) = \frac{c}{2(2+\nu)} ru^2\Big|_{r=0}^{r=a} = \frac{1}{2(2+\nu)\mu} au^2(a) \tag{8}$$

由式(8)易见

$$G(a) \geqslant 0$$

这正是所要证明的. 等号仅出现于$u(a)=0$的情况，即$r=a$恰好是$u(r)$的节点.

在ρ-r关系式(5)中，μ和$|\lambda|$地位相同，所以$P(a)$对λ的依赖关系可以仿照以上步骤进行推导、分析，结果为

$$\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial|\lambda|}P(a) = \int_0^a u(r)\frac{\partial u(r)}{\partial|\lambda|}\mathrm{d}r = \frac{1}{2(2+\nu)|\lambda|} au^2(a) \geqslant 0$$

即作用强度增大时，概率只能增大，不会减少.

式(7)中，如$\nu\to\infty$，则$G(a)\to 0$，这时$P(a)$与μ无关，这正好反映如下事实：无限深势阱中的粒子，波函数与粒子质量无关，因此粒子的空间概率分布与质量无关.

本题证明的结论可以从量纲的角度给以简单解释如下：特征长度r_0和μ、$|\lambda|$的关系(参看题 3.32)为

$$r_0 = \left(\frac{\hbar^2}{\mu|\lambda|}\right)^{\frac{1}{2+\nu}}$$

当μ或$|\lambda|$变化时，如a/r_0保持不变，则概率$P(a)$也不变. 本题的条件是a给定不变，因此μ或$|\lambda|$增大时，r_0变小，a/r_0增大，亦即，如距离以特征长度r_0为单位，则μ或$|\lambda|$增大时，球面半径a/r_0增大，故粒子在球内出现的概率增大.

3.33　中心势场，若 $\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}>0$，则 $\int_0^a\left(V-\langle V\rangle\right)u^2\mathrm{d}r<0$

题 3.33　粒子在中心势场 $V(r)$ 中运动，处于能量本征态

$$\psi=R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{u(r)}{r}Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

如 ψ 已经归一化，则势能平均值等于

$$\langle V\rangle=\int V\psi^*\psi\mathrm{d}^3x=\int_0^\infty V(x)u^2(r)\mathrm{d}r$$

试证明：如 $V(r)$ 为单调上升函数，即 $\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}>0$，则对于任意给定的距离 a，均有

$$\int_0^a\left(V-\langle V\rangle\right)u^2\mathrm{d}r<0 \tag{1}$$

证明　由于 $V(r)$ 是单调上升的，显然对于粒子的任何状态，总可以找到某个 r_0，使

$$V(r_0)=\langle V\rangle$$

而且，当 $r<r_0$ 时，$V(r)<\langle V\rangle$；当 $r>r_0$ 时，$V(r)>\langle V\rangle$. 因此，如 $a<r_0$，式(1)显然成立. 如 $a>r_0$，则

$$\int_a^\infty\left(V-\langle V\rangle\right)u^2\mathrm{d}r<0$$

但因

$$\int_0^\infty\left(V-\langle V\rangle\right)u^2\mathrm{d}r=\langle V\rangle-\langle V\rangle=0$$

所以仍得

$$\int_0^a\left(V-\langle V\rangle\right)u^2\mathrm{d}r<0$$

3.34　类氢离子处在束缚态 ψ_{nlm}，计算 $\langle r^\lambda\rangle$，$\lambda=-1,-2,-3$

题 3.34　类氢离子(核电核 Ze)中电子处于束缚态 ψ_{nlm}，计算 $\langle r^\lambda\rangle$，$\lambda=-1,-2,-3$.

解　已知类氢离子的能级为

$$E_{nlm}=E_n=-\frac{Z^2e^2}{2n^2a_0},\qquad n=n_r+l+1$$

其中 $a_0=\hbar^2/\mu e^2$ 为 Bohr 半径，根据 Virial 定理

$$\left\langle\frac{p^2}{2m}\right\rangle_{nlm}=\left\langle\frac{r}{2}\cdot\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right\rangle_{nlm}=\frac{Ze^2}{2}\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle_{nlm}=-\frac{1}{2}\langle V\rangle_{nlm}$$

所以

$$E_n=\frac{1}{2}\langle V\rangle_{nlm}=-\frac{Ze^2}{2}\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle_{nlm}$$

$$\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle_{nlm}=-\frac{2E_n}{Ze^2}=\frac{Z}{n^2a_0},\qquad n=1,2,3,\cdots$$

其次，ψ_{nlm}的球坐标表示式为

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

它是(H,L^2,L_z)的共同本征态，满足能量本征方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{1}{r}\cdot\frac{\partial^2}{\partial r^2}r\psi_{nlm}+\left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}-\frac{Ze^2}{r}\right]\psi_{nlm}=E_n\psi_{nlm}$$

总能量算符等价于

$$H=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{1}{r}\cdot\frac{\partial^2}{\partial r^2}r+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}-\frac{Ze^2}{r} \tag{1}$$

视l为参变量，式(1)对l求导，利用 Hellmann-Feynman 定理，即得

$$\frac{\partial E}{\partial l}=\left\langle\frac{\partial H}{\partial l}\right\rangle_{nlm}=\left(l+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar^2}{2\mu}\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle_{nlm} \tag{2}$$

由于$n=n_r+l+1$，所以

$$\frac{\partial E}{\partial l}=\frac{\partial E}{\partial n}=\frac{Z^2e^2}{n^3a_0}$$

代入式(2)，并利用$a_0=\dfrac{\hbar^2}{\mu e^2}$，即得

$$\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle_{nlm}=\frac{1}{\left(l+\frac{1}{2}\right)n^3}\frac{Z^2}{a_0^2} \tag{3}$$

最后，计算r^{-3}. 对于s态($l=0$)，$r\to 0$处$\psi\to c$(常数)，所以

$$\left\langle r^{-3}\right\rangle_{n00}\to\infty$$

当$l\neq 0$，利用$\left\langle\dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right\rangle=\left\langle\dfrac{L^2}{\mu r^3}\right\rangle$，即得

$$\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle_{nlm}=\frac{z}{l(l+1)a_0}\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle_{nlm}$$

因此

$$\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle_{nlm}=\frac{1}{n^3l(l+1/2)(l+1)a_0}\left\langle\frac{z}{a_0}\right\rangle^3$$

当$l\to 0$，上式右端$\to\infty$，所以上式实际上适用于一切l值.

讨论　由于总能量算符及径向方程均与磁量子数m无关，所以$\left\langle r^\lambda\right\rangle$与$m$无关. 但$\left\langle r^{-1}\right\rangle$与角量子数$l$也无关，仅取决于主量子数$n$. $\left\langle r^{-2}\right\rangle$及$\left\langle r^{-3}\right\rangle$则与$n,l$均有关，亦即对于能级相同但“轨道形状”不同($l$不同)的各状态，$\left\langle r^{-2}\right\rangle$或$\left\langle r^{-3}\right\rangle$具有不同的数值.

利用式(3)，易得ψ_{nlm}态下离心势能的平均值为

$$\left\langle\frac{l^2}{2\mu r^2}\right\rangle_{nlm}=\frac{l(l+1)Z^2e^2}{(2l+1)n^3a_0}=-E_n\frac{l(l+1)}{\left(l+\frac{1}{2}\right)n}$$

由于$(-E_n)$为动能平均值. 所以在动能中离心势能所占比例为$l(l+1)/(l+1/2)n$，当n确定

后，l 越大，这个比例越大. 当 l 取最大值 $(l=n-1)$，这个比例为 $\dfrac{n-1}{n-1/2}$，这时径向动能仅占动能的 $\dfrac{1}{2n-1}$，所以，如 $n\gg 1$，$(n,n-1,m)$ 态中径向动能很小，这种状态相当于 Bohr 量子论中的圆形轨道.

3.35　类氢离子 $\langle r^\lambda\rangle$ 的 Kramers 递推公式

题 3.35　对于类氢离子(核电荷)的 (H,L^2,L_z) 共同本征态 ψ_{nlm}，证明各 $\langle r^\lambda\rangle$ 之间有递推关系(Kramers 公式)

$$\frac{\lambda+1}{n^2}\langle r^\lambda\rangle-(2\lambda+1)\frac{a_0}{z}\langle r^{\lambda-1}\rangle+\frac{\lambda}{4}\left[(2l+1)^2-\lambda^2\right]\frac{a_0^2}{Z^2}\langle r^{\lambda-2}\rangle=0 \tag{1}$$

求出这个公式成立的条件，并用来计算 $\langle r\rangle$ 及 $\langle r^2\rangle$.

解　ψ_{nlm} 的球坐标表示式为

$$\psi_{nlm}=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{1}{r}u_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

r^λ 的平均值为

$$\langle r^\lambda\rangle_{nlm}=\int r^\lambda\left|\psi_{nlm}\right|^2\mathrm{d}^3x=\int_0^\infty r^\lambda(u_{nl})^2\mathrm{d}r$$

u_{nl} 满足径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}u''+\left[l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}-\frac{Ze^2}{r}\right]u=E_nu \tag{2}$$

由于

$$E_n=-\frac{Z^2e^2}{2n^2a_0},\qquad a_0=\frac{\hbar}{\mu e^2}$$

式(2)可以写成

$$u''+\left[\frac{2Z}{a_0r}-\frac{l(l+1)}{r^2}-\left(\frac{Z}{na_0}\right)^2\right]u=0 \tag{3}$$

用 $r^\lambda u$ 乘式(3)各项，并积分 $\int_0^\infty\cdots\mathrm{d}r$，后三项显然给出 $r^{\lambda-1}$、$r^{\lambda-2}$ 及 r^λ 的平均值，而第一项给出

$$\begin{aligned}\int_0^\infty r^\lambda uu''\mathrm{d}r&=r^\lambda uu'\Big|_0^\infty-\int_0^\infty\left(r^\lambda u'+\lambda r^{\lambda-1}u\right)u'\mathrm{d}r\\&=\left(r^\lambda uu'-\frac{\lambda}{2}r^{\lambda-1}u^2\right)\Bigg|_0^\infty+\frac{\lambda(\lambda-1)}{2}\langle r^{\lambda-2}\rangle-\int_0^\infty r^\lambda(u')^2\,\mathrm{d}r\end{aligned}$$

如果 λ 的取值能够保证

$$r^\lambda uu'\Big|_0^\infty=0,\qquad r^{\lambda-1}u^2\Big|_0^\infty=0 \tag{4}$$

我们就有下列初步结果

$$\left[\frac{\lambda(\lambda+1)}{2}-l(l+1)\right]\left\langle r^{\lambda-2}\right\rangle+\frac{2Z}{a_0}\left\langle r^{\lambda-1}\right\rangle-\left(\frac{Z}{na_0}\right)^0\left\langle r^{\lambda}\right\rangle=\int_0^{\infty}r^{\lambda}(u')^2\mathrm{d}r \tag{5}$$

再用 $2r^{\lambda+1}u'$ 乘以式(3)各项，并积分，依次得到

$$\int_0^{\infty}2r^{\lambda+1}u'u''\mathrm{d}r=r^{\lambda+1}(u')^2\Big|_0^{\infty}-\int_0^{\infty}(\lambda+1)r^{\lambda}\left\langle u'\right\rangle^2\mathrm{d}r$$

$$\int_0^{\infty}2r^{\lambda+1}u'u\mathrm{d}r=r^{\lambda+1}u^2\Big|_0^{\infty}-(\lambda+1)\left\langle r^{\lambda}\right\rangle$$

$$\int_0^{\infty}2r^{\lambda+1}u'\frac{u}{r}\mathrm{d}r=r^{\lambda}u^2\Big|_0^{\infty}-\lambda\left\langle r^{\lambda-1}\right\rangle$$

$$\int_0^{\infty}2r^{\lambda+1}u'\frac{u}{r^2}\mathrm{d}r=r^{\lambda-1}u^2\Big|_0^{\infty}-(\lambda-1)\left\langle r^{\lambda-2}\right\rangle$$

在式(4)得到保证的条件下，以上各式中第一项均为零，故得

$$(\lambda-1)l(l+1)\left\langle r^{\lambda-2}\right\rangle-2\lambda\frac{Z}{a_0}\left\langle r^{\lambda-1}\right\rangle+(\lambda+1)\left(\frac{Z}{na_0}\right)^2\left\langle r^{\lambda}\right\rangle=(\lambda+1)\int_0^{\infty}r^{\lambda}(u')^2\mathrm{d}r \tag{6}$$

将式(5)和式(6)合并，消去右端的积分，即得式(1)，式(1)成立的条件即是式(4). 由于

$$r\to 0,\quad u\sim r^{l+1};\qquad r\to\infty,\quad u\sim r^{n}\mathrm{e}^{-Zr/na_0}$$

易见，为了保证式(4)成立，充分而且必要条件为

$$\lambda>-(2l+1)$$

在式(1)中，如取 $\lambda=0$，并注意到 $\left\langle r^0\right\rangle=1$，立即得到

$$\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle_{nlm}=\frac{Z}{n^2a_0}$$

题 3.34 中已经用 Virial 定理得到这个结果.

依次再取 $\lambda=1,2$，就得到

$$\left\langle r\right\rangle_{nlm}=\frac{1}{2}\left[3n^2-l(l+1)\right]\frac{a_0}{Z}$$

$$\left\langle r^2\right\rangle_{nlm}=\frac{n^2}{2}\left[1+5n^2-3l(l+1)\right]\left(\frac{a_0}{Z}\right)^2$$

例如

$$1\text{s 态(基态)},\ \left\langle r\right\rangle_{100}=\frac{3}{2},\ \left\langle r^2\right\rangle_{100}=3;\qquad 2\text{s 态},\ \left\langle r\right\rangle_{200}=6,\ \left\langle r^2\right\rangle_{200}=42;$$

$$2\text{p 态},\ \left\langle r\right\rangle_{21m}=5,\ \left\langle r^2\right\rangle_{21m}=30 \tag{7}$$

式(7)中，$\left\langle r\right\rangle$ 以 a_0/Z 为单位，$\left\langle r^2\right\rangle$ 以 $(a_0/Z)^2$ 为单位.

注意，如限于本题式(1)，不能计算 $\left\langle r^{-2}\right\rangle$，但如利用上题关于 $\left\langle r^{-2}\right\rangle$ 的计算结果，则只要在式(1)中取 $\lambda=-1$，就可算出 $\left\langle r^{-3}\right\rangle$，结果和上题相同. 如再取 $\lambda=-2(l\geqslant 1)$，就可算出

$$\langle r^{-4} \rangle = \left(\frac{Z}{a_0} \right)^4 \frac{3n^2 - l(l+1)}{2n^5 \left(l - \frac{1}{2} \right) l \left(l + \frac{1}{2} \right) (l+1) \left(l + \frac{3}{2} \right)}$$

计算其他$\langle r^\lambda \rangle$可以依次类推.

3.36 三维各向同性谐振子的本征态中$\langle r^\lambda \rangle$的递推关系

题 3.36 对于三维各向同性谐振子，(H, L^2, L_z)的共同本征态为$\psi_{n_r lm}$，求各$\langle r^\lambda \rangle$的递推关系，并利用得到的递推关系计算$\langle r^2 \rangle$及$\langle r^4 \rangle$.

解 $\psi_{n_r lm}$可以表示为

$$\psi_{n_r lm} = R_{n_r l}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{1}{r} u_{n_r l}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$u_{n_r l}$满足径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} u'' + \left[\frac{1}{2} \mu \omega^2 r^2 + l(l+1) \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \right] u = E_n u \tag{1}$$

利用能级公式

$$E_N = \left(N + \frac{3}{2} \right) \hbar \omega$$

可将式(1)改写为

$$u'' + \left[(2N+3)\alpha^2 - \alpha^4 r^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u = 0 \tag{2}$$

其中$\alpha^2 = \mu\omega/\hbar$，$u_{n_r l}$的渐进行为是

$$r \to 0, \quad u \sim r^{l+1}; \qquad r \to \infty, \quad u \sim r^{N+1} e^{-\alpha^2 r^2/2}$$

分别以$r^\lambda u$和$2r^{\lambda+1} u'$乘以式(2)，再积分，相消，可得$\langle r^\lambda \rangle$得递推关系

$$(\lambda+2)a^4 \langle r^{\lambda+2} \rangle - (\lambda+1)(2N+3)\alpha^2 \langle r^\lambda \rangle + \frac{\lambda}{4}\left[(2l+1)^2 - \lambda^2 \right] \langle r^{\lambda-2} \rangle = 0 \tag{3}$$

适用条件仍为

$$\lambda > -(2l+1)$$

式(3)取$\lambda = 0$，立即得到

$$\langle r^2 \rangle_{n_r lm} = \left(N + \frac{3}{2} \right) \alpha^{-2} = \left(N + \frac{3}{2} \right) \frac{\hbar}{\mu\omega} \tag{4}$$

这个结果很容易由 Virial 定理导出.

式(3)中取$\lambda = 2$，并利用式(4)，可得

$$\langle r^4 \rangle_{n_r lm} = \frac{1}{8}\left[3(2N+3)^2 - (2l+3)(2l-1) \right] \alpha^{-4} \tag{5}$$

例如，$N = 0$(基态，$l = n_r = 0$)

$$\langle r^2 \rangle = \frac{3}{2}\alpha^{-2}, \qquad \langle r^4 \rangle = \frac{15}{4}\alpha^{-4}$$

$N=1$(第一激发能级，$l=1, n_r=0$)

$$\langle r^2\rangle=\frac{5}{2}\alpha^{-2},\qquad \langle r^4\rangle=\frac{35}{4}\alpha^{-4}$$

这些结果不难用直接积分的办法加以验证.

对于给定的能级 E_n，l 可取 $N, N-2, \cdots, (1$ 或 $0)$. 式(4)表明 $\langle r^2\rangle$ 只与 N 直接有关，与 l 无关. 式(5)则表明 $\langle r^4\rangle$ 与 N, l 都有关，N 给定后，l 越大，$\langle r^4\rangle$ 越大.

3.37　原子核的突然 β^- 衰变

题 3.37　电荷为 Ze 的原子核突然发生 β^- 衰变，核电荷变成 $(Z+1)e$. 对于衰变前原子 Z 中的一个 K 电子(1s 层电子)，衰变后仍保持为新原子的 K 电子的概率等于多少？

解　由于原子核的 β^- 衰变是突然发生的，可以认为核外的电子状态还来不及变化. 对于原来的 K 电子，其波函数仍为

$$\psi_{100}(Z,r)=\left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-Zr/a_0}$$

而新原子中电子的波函数应该是

$$\psi_{100}(Z+1,r)=\left[\frac{(Z+1)^3}{\pi a_0^3}\right]^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-(z+1)r/a_0}$$

将 $\psi_{100}(Z,r)$ 按新原子的能量本征态作线性展开

$$\psi_{100}(Z,r)=\sum_{nlm}C_{nlm}\psi_{nlm}(Z+1,r)$$

则衰变前的 1s 电子在衰变后处于新原子的 $\psi_{nlm}(Z+1,r)$ 态的概率为

$$\begin{aligned}P_{nlm}&=|C_{nlm}|^2=\left|\langle\psi_{nlm}(Z+1)|\psi_{100}(Z)\rangle\right|^2\\&=\frac{z^3(z+1)^3}{\pi^2a_0^6}(4\pi)^2\left|\int_0^\infty \mathrm{e}^{-(2Z+1)r/a_0}r^2\mathrm{d}r\right|^2\\&=\frac{Z^3(Z+1)^3}{\left(Z+\frac{1}{2}\right)^6}=\left(1+\frac{1}{Z}\right)^3\left(1+\frac{1}{2Z}\right)^{-6}\end{aligned}$$

当 $Z\gg1$，上式可以近似取成

$$P_{100}\approx1-\frac{3}{4Z^2}$$

例如

$$Z=10,\quad P_{100}\approx0.9932;\qquad Z=30,\quad P_{100}\approx0.9992$$

3.38　用不确定性关系估算氦原子的基态能量

题 3.38　利用不确定性关系估算氦原子的基态能量.

解　氦原子中共有两个电子，电荷各为$-e$，核电核为$2e$，总能量算符为

$$H=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}_1^2+\boldsymbol{p}_2^2\right)-2e^2\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right)+\frac{e^2}{r_{12}} \tag{1}$$

设原子的最概然半径为$r\sim R$，则在式(1)的基态平均值中可取

$$\left\langle\frac{1}{r_1}\right\rangle=\left\langle\frac{1}{r_2}\right\rangle\approx\frac{1}{R},\qquad\left\langle\frac{1}{r_{12}}\right\rangle\approx\frac{1}{2R}$$

根据不确定性关系，可取

$$\left\langle\boldsymbol{p}_1^2\right\rangle=\left\langle\boldsymbol{p}_2^2\right\rangle\approx\hbar^2/R^2$$

因此基态能量约为

$$E=\langle H\rangle\approx\frac{\hbar^2}{mR^2}-\left(4-\frac{1}{2}\right)\frac{e^2}{R} \tag{2}$$

R的取值应使E为极小. 由极值条件

$$\frac{\partial E}{\partial R}=0$$

求得

$$R=\frac{1}{2-1/4}\cdot\frac{\hbar^2}{me^2}=\frac{4}{7}a_0 \tag{3}$$

其中$a_0=\hbar^2/me^2$为 Bohr 半径. 将式(3)代入式(2)，即得

$$E\approx-\left(\frac{7}{4}\right)^2\frac{e^2}{a_0}=-3.06\frac{e^2}{a_0}$$

核原子基态能量的实验值为$-2.9035e^2/a_0$.

3.39　估算核力的力程

题 3.39　按照核力的介子理论，核力的较长程部分是通过核子间传递π介子实现的. 已知π介子质量$m_\pi\sim270m_e$，试据此估算核力力程.

解法一　实验表明，核力与电荷无关. 因此在力程r_0的结构式中，除了介子质量m_π外，只能出现普适常数. 由于问题涉及介子的生灭，有关的普适常数应该包含光速c(代表相对论效应)和 Planck 常量$\hbar$(代表量子效应). 从量纲结构看，由m_π、$\hbar$和c只能构造出一种特征长度，即 Compton 波长. 因此，核力的较长程部分的力程大致是

$$r_0\approx\frac{\hbar}{m_\pi c}=\frac{\hbar c}{m_\pi c^2}=\frac{197\text{MeV}\cdot\text{fm}}{270\times0.511\text{MeV}}=1.4\text{fm}$$

解法二　利用不确定性关系. 问题涉及的能量不定值约为

$$\Delta E\sim m_\pi c^2$$

动量不定值约为

$$\Delta p\sim\Delta E/c\sim m_\pi c$$

位置不定值约为

$$\Delta x\sim\hbar/\Delta p\sim\hbar/m_\pi c$$

Δx(按数量级说)应该就是核力力程r_0，所以

$$r_0 \approx \hbar / m_\pi c = 1.4\text{fm}$$

3.40 对于氢原子基态，验证不确定性关系

题 3.40 对于氢原子的基态，求Δx，Δp_x，验证不确定性关系.

解 氢原子基态波函数为

$$\psi_{100} = \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)^{\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{-r/a_0}$$

宇称为偶. 由于x、p_x均为奇宇称函数，所以

$$\langle x\rangle = 0, \qquad \langle p_x\rangle = 0$$

由于ψ_{100}各项同性，呈对称分布，显然有

$$\langle x^2\rangle = \langle y^2\rangle = \langle z^2\rangle = \frac{1}{3}\langle r^2\rangle; \qquad \langle p_x^2\rangle = \langle p_y^2\rangle = \langle p_z^2\rangle = \frac{1}{3}\langle p^2\rangle$$

容易算出

$$\langle r^2\rangle = \int r^2 (\psi_{100})^2 \mathrm{d}^3x = 3a_0^2$$

$$\langle p^2\rangle = \int |p\psi_{100}|^2 \mathrm{d}^3x = \hbar^2 \int |\nabla\psi_{100}|^2 \mathrm{d}^3x = \hbar^2 \int \left(\frac{\partial}{\partial r}\psi_{100}\right)^2 \mathrm{d}^3x = \frac{\hbar^2}{a_0^2}$$

因此

$$\langle x^2\rangle = a_0^2, \qquad \Delta x = \left[\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2\right]^{\frac{1}{2}} = a_0$$

$$\langle p_x^2\rangle = \frac{\hbar^2}{3a_0^2}, \qquad \Delta p_x = \left[\langle p_x^2\rangle - \langle p_x\rangle^2\right]^{\frac{1}{2}} = \frac{\hbar}{\sqrt{3}a_0}$$

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = \frac{\hbar}{\sqrt{3}} \tag{1}$$

不确定性关系的普遍关系是

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geqslant \frac{\hbar}{2} \tag{2}$$

显然式(1)和式(2)是一致的，而且$\frac{\hbar}{\sqrt{3}}$很接近式(2)规定的下限$\frac{\hbar}{2}$.

3.41 类氢离子$n_r = 0$态的讨论

题 3.41 对于类氢离子(核电荷Ze)的$l = n-1$ $(n_r = 0)$状态，计算(1) 最概然半径$r_{概}$；(2) 平均半径$\langle r\rangle$；(3) 涨落Δr，并和$\langle r\rangle$比较.

解 类氢离子中电子波函数ψ_{nlm}可以表示为

$$\psi_{nlm} = R_{n,l}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{1}{r}u_{n,l}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

(1) 最概然半径由径向概率分布的极值条件

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}u_{n_r l}(r)=0 \tag{1}$$

决定. $l=n-1$时，$n_r=0$

$$u_{0,n-1}(r)=cr^n\mathrm{e}^{-Zr/na_0}$$

利用极值条件(1)，容易得出

$$r_{概}=\frac{n^2a_0}{Z}$$

这个结果和 Bohr 量子论中圆轨道的半径公式一致.

(2) r 的平均值可由 kramers 公式算出，对于本题

$$\langle r\rangle_{n,n-1,m}=\left(n^2+\frac{n}{2}\right)\frac{a_0}{Z}$$

(3) r^2 的平均值 kramers 公式算出，对于本题

$$\langle r^2\rangle_{n,n-1,m}=\left(n^4+\frac{3}{2}n^3+\frac{1}{2}n^2\right)\left(\frac{a_0}{Z}\right)^2$$

$$=n^2\left(n+\frac{1}{2}\right)(n+1)\left(\frac{a_0}{Z}\right)^2$$

因此，r 的涨落为

$$\Delta r=\left[\langle r^2\rangle-\langle r\rangle^2\right]^{\frac{1}{2}}=\left(\frac{n^3}{2}+\frac{n^2}{4}\right)^{\frac{1}{2}}\frac{a_0}{Z}$$

$$\frac{\Delta r}{\langle r\rangle}=\frac{\sqrt{n/2}}{\sqrt{n^2+n/2}}=\frac{1}{\sqrt{2n+1}}$$

可见，n 越大，$\frac{\Delta r}{\langle r\rangle}$ 越小，量子力学的结果和 Bohr 量子化轨道的图像越加接近.

3.42 氢原子 $n_r=0$ 态，电子在经典禁区外的概率

题 3.42 对于氢原子的 $(n,n-1,m)$ 态，求电子在经典禁区($V>E$ 的区域)出现的概率.

解 能级 E_n 给定后，经典允许区和禁区以球面 r_n 为分界，球外为禁区. r_n 由下式决定

$$V(r_n)=-\frac{e^2}{r_n}=E_n=\frac{-e^2}{2n^2a_0}$$

求得

$$r_n=2n^2a_0$$

它是最概然半径的 2 倍. $(n,n-1,m)$ 态波函数为

$$\psi_{n,n-1,m}=Cr^{n-1}\mathrm{e}^{-r/na_0}Y_{n-1,m}(\theta,\varphi)$$

其中 C 为归一化常数. 容易求得

$$C^2=\frac{1}{(2n)!}\left(\frac{2}{na_0}\right)^{2n+1}$$

电子在经典禁区出现的概率为

$$w=\int_n^{\infty}\left(R_{n,n-1}\right)^2r^2\mathrm{d}r=C^2\left(\frac{na_0}{2}\right)^{2n+1}\int_{4n}^{\infty}x^{2n}\mathrm{e}^{-x}\mathrm{d}x$$

这个积分可以用分部积分法算出，结果为

$$w=\left[1+4n+\frac{(4n)^2}{2!}+\frac{(4n)^3}{3!}+\cdots+\frac{(4n)^{2n}}{(2n)!}\right]\mathrm{e}^{-4n}$$

例如

$n=1$(基态)，$w=13\times e^{-4}=0.2381$; $n=2, w=297\times e^{-8}=0.0996$

$n=3$, $w=7457.8\times e^{-12}=0.0485$; $n=4, w=195381\times e^{-16}=0.0220$

$n=5$, $w=5244270\times e^{-20}=0.0108$; $n=10, w=8.669\times10^{13}\times e^{-40}=0.000368$

可见，n很大时，量子力学结果和经典力学结果趋于一致. 这只是对应原理的具体体现.

3.43　氢原子态 s 态中计算 $\Delta x, \Delta p_x$

题 3.43　对于氢原子的各 s 态($nlm=n00$)，计算$\Delta x, \Delta p_x$，并讨论$n\gg1$的情形.

解　由于 s 态各向同性，所以

$$\langle x\rangle=0,\quad \langle p_x\rangle=0,\quad \langle x^2\rangle=\frac{1}{3}\langle r^2\rangle,\quad \langle p_x^2\rangle=\frac{1}{3}\langle p^2\rangle$$

r^2平均值可由 Kramers 公式算出，对于 s 态，为

$$\langle r^2\rangle_{n00}=\frac{n^2}{2}\left(1+5n^2\right)a_0^2$$

因此

$$\Delta x=\sqrt{\langle x^2\rangle}=\frac{\sqrt{\langle r^2\rangle}}{\sqrt{3}}=\frac{n}{\sqrt{6}}\sqrt{1+5n^2}\,a_0$$

当$n\gg1$

$$\Delta x=\sqrt{\frac{5}{6}}na_0$$

p^2平均值可以利用 Virial 定理和能级公式求出

$$\frac{1}{2\mu}\langle p^2\rangle_{n00}=|E_n|=\frac{e^2}{2n^2a_0},\quad \langle p^2\rangle_{n00}=\frac{\mu e^2}{n^2a_0}=\frac{\hbar^2}{n^2a_0^2}$$

因此

$$\Delta p_x=\sqrt{\langle p_x^2\rangle}=\frac{\sqrt{\langle p^2\rangle}}{\sqrt{3}}=\frac{\hbar}{\sqrt{3}na_0}$$

$$\Delta x\cdot\Delta p_x=\sqrt{\frac{1+5n^2}{18}}\hbar$$

当 $n \gg 1$

$$\Delta x \Delta p_x \approx \sqrt{\frac{5n}{18}}\hbar = 0.527 n\hbar$$

差不多是不确定性关系规定的下限 $\hbar/2$ 的 n 倍.

3.44 碱金属价电子受屏蔽势作用时的能级

题 3.44 单价原子中价电子(最外层电子)所受原子实(原子核及内层电子)的作用势近似表示为

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} - \lambda\frac{e^2 a_0}{r^2}, \qquad 0 < \lambda \ll 1$$

a_0 为 Bohr 半径. 求价电子的能级，并与氢原子能级作比较.

解 取守恒量完全集为 (H, L^2, L_z)，其共同本征函数为

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{u(r)}{r}Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$u(r)$ 满足径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}u'' + \left[l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r} - \lambda\frac{e^2 a_0}{r^2}\right]u = Eu \tag{1}$$

令

$$l(l+1) - 2\lambda = l'(l'+1) \tag{2}$$

式(1)就可以化为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}u'' + \left[l'(l'+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r}\right]u = Eu \tag{3}$$

相当于氢原子径向方程中 l 换为 l'. 所以式(3)的求解过程完全类似氢原子问题. 后者能级为

$$E_n = -\frac{e^2}{2n^2 a_0}, \qquad n = n_r + l + 1, \qquad n_r = 0, 1, 2, \cdots$$

将 l 换为 l'，即得价电子的能级

$$E_{nl} = -\frac{e^2}{2(n')^2 a_0}, \qquad n' = n_r + l' + 1 \tag{4}$$

通常令

$$l' = l + \Delta_l$$

$$n' = n_r + l + \Delta_l + 1 = n + \Delta_l$$

Δ_l 称为量子数 l 和 n 的“修正数”. 由于 $\lambda \ll 1$，可以对式(2)作如下近似处理

$$l(l+1) - 2\lambda = l'(l'+1) = (l+\Delta_l)(l+\Delta_l+1)$$

$$= l(l+1) + (2l+1)\Delta_l + (\Delta_l)^2$$

省略去 $(\Delta_l)^2$，即得

$$\Delta_l \approx \frac{-\lambda}{l+1/2} \tag{5}$$

由于$\lambda \ll 1$，所以$|\Delta_l| \ll 1$. 因此，本题所得能级E_{nl}和氢原子能级仅有较小的差别，但是能级的"l简并"已经消除，式(4)和碱金属光谱的实验资料大体一致，尤其是，修正数$|\Delta_l|$随l升高而减小，和实验符合得极好.

式(2)的精确解为

$$l' = -\frac{1}{2} + \left(l + \frac{1}{2}\right)\left[1 - \frac{8\lambda}{(2l+1)^2}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{6}$$

如对式(6)作二项展开，保留λ项，略去λ^2以上各项，即可得到式(5).

3.45　中心力场等效势的讨论

题 3.45　中心力场问题中，$V(r)$和离心势能之和为等效势能，记作

$$V_l(r) = V(r) + l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}$$

如V_l存在极小值，相应的距离称为"平衡距离"，对于类氢离子(核电荷Ze)，$l \gg 1$的情形，试按下列步骤处理径向方程：

(1) 求V_l的极小值及平衡距离r_l；

(2) 将V_l在r_l附近作 Taylor 展开，保留$(r-r_l)^2$项；

(3) 视电子的径向运动为$r-r_l$附近的小振动，对于确定的$l(l \gg 1)$，求最低能级和激发能级，并和精确解比较.

解　(1) 类氢离子的势能和等效势能为

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}, \quad V_l(r) = l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{r}$$

由极值条件

$$\frac{\partial V_l}{\partial r} = 0$$

求出

$$r_l = l(l+1)\frac{a_0}{Z}$$

$$V_l(r_l) = -\frac{Z^2 e^2}{2l(l+1)a_0} = -\frac{Ze^2}{2r_l}$$

其中

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$$

(2) 令$r = r_l + \xi$，将$V_l(r)$在r_l附近作 Taylor 展开

$$V_l(r) = V_l(r_l + \xi) = V_l(r_l) + V_l''(r_l)\frac{\xi^2}{2!} + \cdots = V_l(r_l) + \frac{1}{2}\mu\omega_l^2\xi^2 + \cdots \tag{1}$$

其中

$$\mu\omega_l^2 = V_l''(r_l) = 3l(l+1)\frac{\hbar^2}{\mu r_l^4} - \frac{2Ze^2}{r_l^3} = \frac{Ze^2}{r_l^3}$$
$$\omega_l^2 = \frac{Ze^2}{\mu r_l^3} = \frac{(Ze)^4}{l^3(l+1)^3\hbar^2 a_0^2} \tag{2}$$

(3) (H, L^2, L_z)的共同本征态可以表示为

$$\psi = R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{u(r)}{r}Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$u(r)$满足径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2u}{dr^2} + V_l(r)u = Eu$$

将V_l的展开式(1)代入上式，即得

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\xi^2} + \frac{1}{2}\mu\omega_l^2\xi^2 u = \left[E - V_l(r_l)\right]u = E'u \tag{3}$$

式(3)在形式上正是一维谐振子的能量本征方程，本征值为

$$E - V_l(r_l) = E' = \left(n_r + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_l, \qquad n_r = 0,1,2,\cdots \tag{4}$$

将式(2)代入式(4)，即得本题所求能级公式

$$E = V_l(r_l) + \left(n_r + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_l = -\frac{Z^2e^2}{2a_0}\left[\frac{1}{l(l+1)} - \frac{1+2n_r}{l^{3/2}(l+1)^{3/2}}\right] = E_{n_r l} \tag{5}$$

由于利用了近似展开式(1)，所以式(5)只适用于n_r较小的情形，即“小振动”．式(5)的特点是，能级间距是均匀的．可以按照$n_r = 0,1,2,\cdots$，将他们依次记为E_{0l}、E_{1l}、E_{2l}、$\cdots$．

类氢离子能级的精确解为

$$E_n = -\frac{Z^2e^2}{2n^2a_0}, \qquad n = l + n_r + 1 \tag{6}$$

现在将式(5)，式(6)在$l \gg 1, n_r \ll l$条件下加以比较．对于给定的l，精确解式(6)中的最低能级$(n_r = 0)$为

$$E_n(n_r = 0) = E_{l+1} = -\frac{Z^2e^2}{2(l+1)^2a_0} \tag{7}$$

低激发$(n_r \ll l)$能级为

$$E_n = E_{l+1+n_r} = -\frac{Z^2e^2}{2(l+1+n_r)^2a_0}$$
$$= E_{l+1}\left(1 + \frac{n_r}{l+1}\right)^{-2} \approx E_{l+1}\left(1 - \frac{2}{l+1}n_r\right)$$

能级间距也是近似均匀的，相邻能级之差为

$$\Delta E \approx \frac{2}{l+1}\left|E_{l+1}\right| = \frac{Z^2e^2}{(l+1)^3a_0} \tag{8}$$

式(5)的最低能级为

$$E_{0l}=-\frac{Z^2e^2}{2a_0}\left[\frac{1}{l(l+1)}-\frac{1}{l^{3/2}(l+1)^{3/2}}\right]$$
$$=-\frac{Z^2e^2}{2a_0(l+1)^2}\left(\frac{l+1}{l}-\frac{\sqrt{l+1}}{l^{3/2}}\right)$$

由于$l\gg 1$，可以取近似

$$\frac{l+1}{l}-\frac{\sqrt{l+1}}{l^{3/2}}=1+\frac{1}{l}-\frac{1}{l}\sqrt{1+\frac{1}{l}}\approx 1-\frac{1}{2l^2}$$

因此

$$E_{0l}\approx E_{l+1}\left(1-\frac{1}{2l^2}\right)$$

和式(7)很接近. 式(5)的能级间距为

$$\hbar\omega_l=\frac{Z^2e^2}{a_0[l(l+1)]^{3/2}}=\frac{Z^2e^2}{a_0(l+1)^3}\left(\frac{l+1}{l}\right)^{\frac{3}{2}}\approx\frac{Z^2e^2}{a_0(l+1)^3}\left(1+\frac{3}{2l}\right)$$

和式(8)很接近.

3.46　双原子分子，分子内部运动能级的近似表达式

题 3.46　双原子分子中两原子的相对运动波函数(H,L^2,L_z)的共同本征函数可以表示为

$$\psi=R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{1}{r}u(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

其中球谐函数Y_{lm}描写分子的转动. $u(r)$满足径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}u''+\left[V(r)+l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u=Eu \tag{1}$$

其中μ为约化质量，$l=0,1,2,\cdots$为转动角动量量子数，$V(r)$为两个原子的相互作用势. 近似的取$V(r)$为振子势能

$$V(r)=\frac{1}{2}\mu\omega_0^2(r-R)^2$$

R为分子键长，即振动、转动完全停止时两个原子核间的距离. 设

$$\frac{1}{2}\mu\omega_0^2R^2\gg l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu R^2}=E_l \tag{2}$$

(E_l是$r=R$时分子的转动能级)，试求分子内部运动(振动和转动)能级E的近似表达式，并扼要说明各项的意义.

解　径向方程(1)中，等效势能为

$$V_l(r)=V(r)+l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}=\frac{1}{2}\mu\omega_0^2(r-R)^2+l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \tag{3}$$

在条件(2)下，必然存在平衡点r_0，$V_l(r_0)$取极小值. r_0由极值条件

$$\left.\frac{\mathrm{d}V_l}{\mathrm{d}r}\right|_{r=r_0}=0 \tag{4}$$

确定如下

$$\frac{\mathrm{d}V_l}{\mathrm{d}r}=\mu\omega_0^2(r-R)-l(l+1)\frac{\hbar^2}{\mu r^3}\approx\mu\omega_0^2(r-R)-l(l+1)\frac{\hbar^2}{\mu R^3}$$

利用式(4)即得

$$r_0\approx R+l(l+1)\frac{\hbar^2}{\mu\omega_0^2R^3} \tag{5}$$

其中第二项是由于转动引起的键的伸长.

将$V_l(r)$在平衡点r_0附近作 Taylor 展开，得到

$$V_l(r)=V_l(r_0)+\frac{1}{2}V_l''(r_0)(r-r_0)^2+\cdots$$

略去$(r-r_0)^3$以上各项，并令

$$x=r-r_0,\qquad V_l''(r_0)=\mu\omega^2 \tag{6}$$

即得

$$V_l(r)=V_l(r_0)+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2$$

代入径向方程(1)，即得

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2u=\left[E-V_l(r_0)\right]u=E'u \tag{7}$$

式(7)形式上和一维谐振子的能量本征方程完全一样，所以

$$E-V_l(r_0)=E'=\left(v+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\qquad v=0,1,2,3,\cdots \tag{8}$$

v为振动量子数. 由式(3)、式(4)容易求出

$$V_l(r_0)=\frac{1}{2}\mu\omega_0^2\left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{\mu^2\omega_0^2R^3}\right]^2+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_0^2} \tag{9}$$

其中

$$\frac{1}{r_0^2}=\frac{1}{R^2}\left[1+\frac{l(l+1)\hbar^2}{\mu^2\omega_0^2R^4}\right]^{-2}\approx\frac{1}{R^2}-\frac{2l(l+1)\hbar^2}{\mu^2\omega_0^2R^6}$$

代入式(9)得

$$V_l(r_0)\approx\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu R^2}-\frac{l^2(l+1)^2\hbar^4}{2\mu^2\omega_0^2R^6} \tag{10}$$

由式(3)、式(5)、式(9)可得

$$\omega^2=\frac{1}{\mu}V_l''(r_0)=\omega_0^2+3l(l+1)\frac{\hbar^2}{\mu^2r_0^4}$$

$$\omega=\omega_0\left[1+3l(l+1)\frac{\hbar^2}{\mu^2\omega_0^2r_0^4}\right]^{\frac{1}{2}}\approx\omega_0+\frac{3l(l+1)\hbar^2}{2\mu\omega_0R^4}$$

将式(10)代入式(8)，即得分子能级的表达式

$$E_{vl} \approx \left(v+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega + E_l - \frac{l^2(l+1)^2\hbar^4}{2\mu^3\omega_0^2R^6}, \qquad v=0,1,2,3,\cdots, l=0,1,2,3,\cdots \tag{11}$$

$$E_l = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu R^2}$$

式(11)中第三项是由于分子键长可变而引起的振-转修正项.

3.47 Morse 势的 s 态解

题 3.47 双原子分子中两原子间的作用可以用 Morse 势

$$V(r) = V_0\left[1-\mathrm{e}^{-(r-R)/a}\right]^2 - V_0 \tag{1}$$

来描写. 对于分子内部运动(相对运动)的 s 态 ($l=0$)，试设法解出径向方程，确定能级公式(束缚态).

解 s 态波函数可以写为

$$\psi(r) = \frac{u(r)}{r}$$

$u(r)$ 满足径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2} + V(r)u = Eu, \qquad -V_0 < E < 0 \tag{2}$$

u 为约化质量，r 为两原子核间距离.

由式(1)可知，$r=R$ 时 $V(r)$ 取极小值 $-V_0$，故 R 相当于分子的键长. 根据实验测定，$R>a$ (数量级相同)，所以将 $V(r)$ 在 $r\sim R$ 附近作 Taylor 展开的办法对于本题不适用. 试作变换

$$\xi = \mathrm{e}^{-(r-R)/a} \tag{3}$$

则

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} = \frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}r}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} = -\frac{\xi}{a}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}$$

式(2)变为

$$\xi\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\xi^2} + \xi\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\xi} + (2\alpha^2\xi - \alpha^2\xi^2 - \beta^2)u = 0 \tag{4}$$

其中

$$\alpha = \frac{a}{\hbar}\sqrt{2\mu V_0}, \qquad \beta = \frac{a}{\hbar}\sqrt{-2\mu E}$$

由定义式(3)易见

$$r\to\infty,\ \xi\to 0; \quad r\to R,\ \xi\to 1; \quad r\to 0,\ \xi\to \mathrm{e}^{R/a}\gg 1$$

近似地可以认为 $r\to 0$ 相当于 $\xi\to\infty$，根据 $\xi\to 0,\infty$ 处式(4)的渐进性质，令

$$u = \xi^{\beta}\mathrm{e}^{-\alpha\xi}F(\xi)$$

代入式(4)，得到 $F(\xi)$ 满足的方程

$$\xi\frac{\mathrm{d}^2F}{\mathrm{d}\xi^2} + (2\beta+1-2a\xi)\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}\xi} - (\alpha+2\alpha\beta-2\alpha^2)F = 0 \tag{5}$$

在令 $\eta = 2a\xi$，式(5)就变为合流超几何方程

$$\eta\frac{\mathrm{d}^2F}{\mathrm{d}\eta^2}+(2\beta+1-\eta)\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}\eta}-\left(\beta-\alpha+\frac{1}{2}\right)F=0 \tag{6}$$

式(6)当 $\eta\to 0\ (\xi\to 0, r\to\infty)$ 能使 $u\to 0$ 的解

$$F=F\left(\beta+\frac{1}{2}-\alpha, 2\beta+1, 2\alpha\beta\right) \tag{7}$$

为了保证 $\xi\to\infty$ 处 $u\to 0$，合流超几何方程式(7)必须中断成 ν 次多项式，其条件为

$$\beta+\frac{1}{2}-\alpha=-\nu,\qquad \nu=0,1,2,\cdots$$

即

$$\beta=\alpha-\left(\nu+\frac{1}{2}\right)$$

即得能级公式

$$\begin{aligned}E_\nu &= -\beta^2\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}=-\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}\left[\alpha-\left(\nu+\frac{1}{2}\right)\right]^2\\ &=\left(\nu+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar}{a}\sqrt{\frac{2V_0}{\mu}}-V_0-\left(\nu+\frac{1}{2}\right)^2\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}\\ &=\left(\nu+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega-V_0-\left(\nu+\frac{1}{2}\right)^2\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}\end{aligned} \tag{8}$$

其中 $\omega=\sqrt{\dfrac{2V_0}{\mu a^2}}$，式(8)中第一项相当于谐振子振动能级，第三项为 $V(r)$ 中的非谐成分引起的能级修正. 式(8)仅当 ν 不太大时才成立，而且必须 $V_0a^2>\dfrac{\hbar^2}{32\mu}$，以保证 $E_\nu<-V_0$.

3.48　有限深球方势阱的一般讨论

题 3.48　质量为 μ 的粒子在"球方势阱"中运动

$$V(r)=\begin{cases}0, & r<a\\ V_0>0, & r\geqslant a\end{cases}$$

只考虑束缚态 $(0<E<V_0)$. 设 V_0 由小到大逐渐变化. (1) 求出现第一个束缚态时 V_0a^2 之值；(2) 对角量子数 l 的每一个值 $(l=0,1,2,\cdots)$，求出现一个新的束缚态(相应能级 $E_{nl}\approx V_0$)的条件；(3) 求各能级出现的先后次序；(4) 对于很大的 V_0 值，估算束缚态总数.

解　作为中心力场问题，可以取束缚态波函数为 (H, L^2, L_z) 的共同本征函数，写成

$$\psi=R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

径向方程为

$$R''+\frac{2}{r}R'+\left[\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-V)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R=0 \tag{1}$$

当 V_0 由小到大逐渐变化，出现新束缚态时 $E\approx V_0$，式(1)成为

$$R''+\frac{2}{r}R'+\left[\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R=0,\qquad r<a\,(\text{阱内})\tag{2}$$

$$R''+\frac{2}{r}R'-\frac{l(l+1)}{r^2}R=0,\qquad r>a\,(\text{阱外})\tag{3}$$

阱内方程(2)正是球 Bessel 方程，物理上许可的解为球 Bessel 函数

$$R(r)=j_l(k_0r),\qquad k_0=\sqrt{\frac{2\mu V_0}{\hbar}}\tag{4}$$

阱外方程(3)的解为

$$R(r)=\frac{C}{r^{l+1}}$$

(另一解 r^l 不符合"$r\to\infty$ 处 $R\to0$"的束缚态边界条件，舍去)显然有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left[r^{l+1}R(r)\right]=0,\qquad r>a\tag{5}$$

在 $r=a$ 处，R 及 R' 应该连续，因此对于阱内波函数(4)，当 $r\to a$ 也应满足条件(5)，即

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left[r^{l+1}j_l(k_0r)\right]_{r=a}=0\tag{6}$$

利用公式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[x^{l+1}j_l(x)\right]=x^{l+1}j_{l-1}(x)$$

式(6)可以化为

$$j_{l-1}(k_0a)=0\tag{7}$$

这就是出现一个新束缚态(角量子数 l，能级 $E_{nl}\approx V_0$)的条件.

第一个束缚态 $l=0$，考虑到

$$j_{-1}(k_0a)=\frac{\cos k_0a}{k_0a}$$

故出现一条 s 态 $(l=0)$ 新能级 $(E\approx V_0)$ 的条件为

$$\cos k_0a=0,\qquad k_0a=\frac{\pi}{2},\frac{3\pi}{2},\frac{5\pi}{2},\cdots$$

出现第一个束缚态时，$k_0a=\frac{\pi}{2}$，即

$$V_0a^2=\frac{\pi^2\hbar^2}{8\mu}$$

当 V_0 逐渐增大，每当满足式(7)，就出现一条新能级 $E_{anl}\approx V_0$，根据球 Bessel 函数 $j_l(x)$ 的令点数值，可以确定各能级的出现次序为

1s, 1p, 1d, 2s, 1f, 2p, 1g, 2d, 3s, 1h, 2f, 1i, 3p, 2g, 1k, 3d, 4s,⋯

各光谱符号代表 l 值为

l	0	1	2	3	4	5	6	7
字母	s	p	d	f	g	h	i	j

当V_0很大时，可按"相空间中每h^3范围有一个束缚态"来估算束缚态总数. 处于束缚态的粒子，在阱内的最大动量为

$$p_0 = \hbar k_0 = \sqrt{2\mu k}$$

因此，束缚态所占相空间总范围为

$$\frac{4\pi}{3}a^3\frac{4\pi}{3}p_0^3 = \frac{16}{9}\pi^2(a\hbar k_0)^3 = \Omega$$

束缚态总数为

$$N \approx \frac{\Omega}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{2\pi^2}{9}\left(\frac{ak_0}{\pi}\right)^3 = \frac{2\pi^2}{9}\left(\frac{a}{\pi\hbar}\right)^3(2\mu V_0)^{3/2} \tag{8}$$

例如，当$ak_0 = \dfrac{7\pi}{2}$，最高能级为4s，由能级序列具体数出由1s到4s的全部状态数(注意能级E_{nl}的简并度为$2l+1$)为99，而由式(8)则得$N \approx 94$，二者的确很接近.

3.49 n-p 体系束缚态

题 3.49 氘核由质子和中子结合而成，是质子-中子体系唯一的束缚态. 根据实验测定，结合能为2.23MeV，如n-p作用势近似的用球方势阱表示

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r < a \\ 0, & r > a \end{cases} \tag{1}$$

求力程和作用强度V_0的数值关系.

解 n-p 体系既然只有唯一的束缚态，应该就是基态，$l=0$，也就是说，V_0a^2的值，仅够形成一个s态能级，而不足以形成p态能级. 根据上题讨论，可知V_0a^2比$\dfrac{\pi^2\hbar^2}{8\mu}$稍大. 作为粗略估算，可取

$$a^2 \approx \frac{\pi^2\hbar^2}{8\mu V_0} = \frac{\pi^2(\hbar c)^2}{8\mu c^2 V_0} \tag{2}$$

其中

$$\mu = \frac{m_n m_p}{m_n + m_p}, \qquad 2\mu c^2 = 939\text{MeV}, \qquad \hbar c = 197\text{MeV}\cdot\text{fm}$$

由式(2)给出的V_0-a数值关系如下表

V_0/MeV	30	25	20
a/fm	1.84	2.02	2.26

下面作比较精确的计算，n-p体系相对运动的s态波函数可以表示为

$$\psi(r) = \frac{u(r)}{r}$$

$u(r)$满足径向方程

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}[E-V(r)]u=0,\qquad -V_0<E<0 \tag{3}$$

以式(1)代入式(3)，即得

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}+\alpha^2u=0,\qquad r<a \tag{4}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}-\beta^2u=0,\qquad r\geqslant a$$

其中

$$\alpha=\sqrt{\frac{2\mu(V_0+E)}{\hbar^2}},\qquad \beta=\sqrt{\frac{-2\mu E}{\hbar^2}} \tag{5}$$

边界条件为

$$\text{当}\ r\to 0\ \text{时},\ u\to 0;\qquad \text{当}\ r\to\infty\ \text{时},\ u\to 0 \tag{6}$$

满足边界条件式(6)的式(4)的解为

$$u=A\sin\alpha r,\qquad r<a$$

$$u=B\mathrm{e}^{-\beta r},\qquad r\geqslant a$$

利用 $r=a$ 处 u'/u 的连续条件，容易求得能级方程

$$\cot(\alpha a)=-\frac{\beta}{\alpha} \tag{7}$$

式(7)和下式等价

$$\sin^2(\alpha a)=\frac{\alpha^2}{\alpha^2+\beta^2}=1+\frac{E}{V_0}$$

本题能级值已由实验给出，$E=-2.23\text{MeV}$，则指定一个 V_0 值，由式(5)就可以算出 α，再由式(7)就可以求出相应的 a 值. 数值结果如下表(注意 $\pi/2<a\alpha<\pi$).

V_0/MeV	30	25	20
a/fm	2.26	2.53	2.92

3.50　介子的弹性袋模型

题 3.50　有一个关于基本粒子的非常简单的“袋”模型，将介子描述成限制在弹性口袋的夸克-反夸克态. 袋为球形，半径(可变) R，表面张力系数 $\sigma=50\text{MeV}/(\text{fm})^2$. 夸克-反夸克均为非相对论粒子处理，静质量取为 $200\text{MeV}/c^2$，不考虑相互作用. (1) 当 R 固定，估算夸克-反夸克体系基态能量(不包括静止能量)；(2) 允许 R 变化，计算基态的“袋”半径，并和公认的“介子”大小作比较.

解　(1) 当半径 R 固定，夸克-反夸克(质量均为 m)可以认为在无限球深势阱中运动，基态 $(l=0)$ 能级为

$$E_1=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mR^2}$$

因此体系的基态能量为

$$E_0(R)=2E_1=\frac{\pi^2\hbar^2}{mR^2}$$

(2) 当 R 可变化，还应该考虑弹性袋的表面能

$$E_\sigma(R)=4\sigma\pi R^2$$

R 的取值应使 $E_0(R)+E_\sigma(R)$ 为极小. 由极值条件

$$\frac{\partial\left(E_0(R)+E_\sigma(R)\right)}{\partial r}=0$$

求得

$$R=\left(\frac{\pi\hbar^2}{4m\sigma}\right)^{1/4}=\left(\frac{\pi\hbar^2c^2}{4mc^2\sigma}\right)^{1/4}$$

$$=\left(\frac{\pi}{4}\cdot\frac{(197\mathrm{MeV}\cdot\mathrm{fm})^2}{200\mathrm{MeV}\times 50\mathrm{MeV}\cdot(\mathrm{fm})^{-2}}\right)^{\frac{1}{4}}=1.3\mathrm{fm}$$

公认的基本粒子的线度正是这个数量级.

3.51 二维和三维中心力场能量本征值的对应关系

题 3.51 求二维和三维中心力场能量本征值问题的对应关系. 对于氢原子和各向同性谐振子，利用已知的三维问题能级公式，导出相应的二维问题的能级公式.

解 众所周知，在三维中心力场问题中，(H,L^2,L_z) 的共同本征态可以表示为

$$\psi(r,\theta,\varphi)=R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{u(r)}{r}Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$u(r)$ 满足径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}+\left[V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u=Eu \tag{1}$$

二维中心力场的能量本征方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi+V(\rho)\psi=E'\psi$$

Laplace 算符 ∇^2 的平面极坐标表示式为

$$\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\cdot\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\cdot\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

(H,L_z) 的共同本征态为

$$\psi(\rho,\varphi)=R(\rho)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\Lambda\varphi}$$

其中 $\Lambda=0,\pm1,\pm2,\cdots,R(\rho)$ 满足径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}+\frac{1}{\rho}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}-\frac{\Lambda^2}{\rho^2}\right)R+V(\rho)=E'R$$

令

$$R(\rho)=\frac{v(\rho)}{\rho^{1/2}}$$

可得$v(\rho)$满足的方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{\mathrm{d}^2v}{\mathrm{d}\rho^2}+\left[V(\rho)+\left(\varLambda^2-\frac{1}{4}\right)\frac{\hbar^2}{2\mu\rho^2}\right]v=E'V \tag{2}$$

式(1)和式(2)的结构完全相似，其对应关系为

$$r\leftrightarrow\rho,\quad u\leftrightarrow v,\quad l\leftrightarrow|\varLambda|-\frac{1}{2},\quad E\leftrightarrow E'$$

由此可见，如将三维中心力场能级公式中的量子数l换为$|\varLambda|-\frac{1}{2}$，即得相应的二维中心力场能级公式.

例如，三维氢原子，$V=-\frac{e^2}{r}$，束缚态能级为

$$E=-\frac{e^2}{2n^2a_0},\qquad a_0=\frac{\hbar^2}{\mu e^2}(\text{Bohr 半径}),\qquad n=n_r+l+1=1,2,3,\cdots$$

其中$n_r=0,1,2,3,\cdots$为径向量子数，和角量子数l互相对立，n_r出现于径向方程(1)的求解过程. 仿此，对于二维氢原子，$V=-\frac{e^2}{\rho}$，由式(2)求解，必然得出束缚态能级为

$$E=-\frac{e^2}{2\left(n_\rho+|\varLambda|+\frac{1}{2}\right)^2a_0}$$

其中$n_\rho=0,1,2,3,\cdots$为径向量子数.

又如，三维各向同性谐振子，$V=\frac{1}{2}\mu\omega^2r^2$，能级为

$$E=\left(N+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega,\qquad n=L+2n_r=0,1,2,\cdots$$

其中，$n_r=0,1,2,3,\cdots$为径向量子数. 仿此，对于二维各向同性谐振子，$V=\frac{1}{2}\mu\omega^2\rho^2$，

$$E=\left(2n_\rho+|\varLambda|+1\right)\hbar\omega$$

其中，$n_\rho=0,1,2,3,\cdots$为径向量子数.

3.52　在无限长圆筒中运动粒子的能量

题 3.52　设粒子在无限长的圆筒中运动，筒半径为a，求粒子能量.

解　柱坐标下的 Schrödinger 方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\cdot\frac{\partial}{\partial\rho}\right)+\frac{L_z^2}{2m\rho^2}-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]\psi=E\psi$$

用分离变量法求解该方程

$$\begin{cases}\left[-\dfrac{\hbar^2}{2m}\left(\dfrac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\dfrac{1}{\rho}\cdot\dfrac{\partial}{\partial\rho}\right)+\dfrac{\nu^2\hbar^2}{2m\rho^2}-\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}\right]R(\rho)=ER(\rho)\\ \left(\dfrac{\partial^2}{\partial z^2}+k^2\right)Z(z)=0\\ (L_z^2-\nu^2\hbar^2)\Phi(\phi)=0\end{cases}$$

关于径向是一个柱 Bessel 方程

$$\begin{cases}\left(\dfrac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\dfrac{1}{\rho}\cdot\dfrac{\partial}{\partial\rho}\right)R(\rho)+\left(\dfrac{2mE}{\hbar^2}-k^2-\dfrac{\nu^2}{\rho^2}\right)R(\rho)=0\\ R(a)=0,\ rR(r\to 0)\to 0\end{cases}$$

解得

$$R(\rho)=AJ_\nu(\omega\rho)+BN_\nu(\omega\rho),\qquad \omega=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}-k^2}$$

因为 $R(0)$ 有界，$B=0$；由 a 端边界条件 $J_\nu(\omega a)=0$，此方程的零点依次记为 $\omega_1,\omega_2,\omega_3,\cdots$. 所以方程的解为

$$R(\rho)=J_\nu(\omega_n\rho),\qquad \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}-k^2}=\omega_n$$

粒子的能量

$$E=\frac{\hbar^2}{2m}(k^2+\omega_n^2)$$

3.53　中心力场束缚态能级对磁量子数 m 简并

题 3.53　粒子在中心力场 $V(r)$ 中运动，试证明体系束缚态能级 E 对磁量子数 m 简并，简并度为 $2l+1$.

证明　在中心力场 $V(r)$ 中运动粒子的 Hamilton 算符为

$$H=\frac{p^2}{2\mu}+V(r)$$

由于

$$\begin{aligned}\left[L_z,p^2\right]&=\left[(xp_y-yp_x),\left(p_x^2+p_y^2+p_z^2\right)\right]\\&=\left[xp_y,\left(p_x^2+p_y^2+p_z^2\right)\right]-\left[yp_x,\left(p_x^2+p_y^2+p_z^2\right)\right]\\&=\left[xp_y,p_x^2\right]-\left[yp_x,p_y^2\right]\end{aligned}$$

其中

$$\left[xp_y,p_x^2\right]=x\left[p_y,p_x^2\right]+\left[x,p_x^2\right]p_y=\left[x,p_x^2\right]p_y=2\mathrm{i}\hbar p_xp_y$$

同理

$$\left[yp_x,p_y\right]=2\mathrm{i}\hbar p_yp_x$$

所以

$$\left[L_z, \boldsymbol{p}^2\right] = 2i\hbar p_x p_y - 2i\hbar p_y p_x = 0$$

同理

$$\left[L_x, \boldsymbol{p}^2\right] = 0; \qquad \left[L_y, \boldsymbol{p}^2\right] = 0$$

即

$$\left[\boldsymbol{L}, \boldsymbol{p}^2\right] = 0$$

于是

$$\left[L^2, \boldsymbol{p}^2\right] = 0$$

又

$$\left[\boldsymbol{L}, V(r)\right] = 0$$

所以

$$\left[\boldsymbol{L}, H\right] = 0, \qquad \left[L^2, H\right] = 0 \tag{1}$$

于是可取 $\{H, L^2, L_z\}$ 作为体系的力学量完全守恒集，他们的共同本征函数完备集为 $\{|E,l,m\rangle\}$

$$H|E,l,m\rangle = E|E,l,m\rangle \tag{2}$$

又由式(1)知道

$$[H, L_\pm] = 0$$

所以

$$H\left(L_\pm|Elm\rangle\right) = L_\pm\left(H|Elm\rangle\right) = E\left(L_\pm|Elm\rangle\right) \tag{3}$$

比较式(2)和式(3)可知，若态 $|Elm\rangle$ 是 H 的相应于本征值 E 的本征矢，则 $L_\pm|Elm\rangle$ 是 H 的相应于同一本征值 E 的本征矢，即 $|Elm\rangle$ 与 $L_\pm|Elm\rangle$ 是互为简并的简并态，而

$$L_\pm|Elm\rangle = \sqrt{(l\mp m)(l\mp m+1)}\hbar|E,l,m\pm 1\rangle$$

所以 $|Elm\rangle$ 与 $|Elm\pm 1\rangle$ 是互为简并的简并态，即 E 关于磁量子数 m 简并. 又对于给定的 l 值而言，$m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots, \pm l$ 共有 $(2l+1)$ 个值，因而这样的简并态共有 $(2l+1)$ 个. 所以有心力场中运动的粒子，束缚定态能量具有 $(2l+1)$ 重简并.

3.54　中心力场存在束缚态的充分条件

题 3.54　粒子在中心力场 $V(r)$ 中运动，设势能函数满足条件 $V(r)\leqslant 0$ $(0\leqslant r<\infty)$ 及 $V(r)\xrightarrow{r\to\infty}0$，试求体系存在束缚定态的充分条件. 再应用此条件于下列体系：(1) $V(r) = -V_0\delta(r-a)$ $(V_0>0)$; (2) $V(r) = -V_0 e^{-r/a}$ $(V_0>0)$; (3) Yukawa 势 $V(r) = -V_0\dfrac{e^{-r/a}}{r}$, $(V_0>0)$；(4) $V(r) = -V_0 e^{-r^2/a^2}$ $(V_0>0)$

解　假定体系存在一个束缚定态，即基态. 记基态能量为 E_0. 由题设条件

$$V(r)\leqslant 0 \qquad 0\leqslant r<\infty, \qquad V(r)\xrightarrow{r\to\infty}0$$

知体系束缚定态能量 $E_n<0$，即

$$E_0 < 0$$

又设相应的基态波函数为 $(l = 0)$

$$\psi_0(r) = R_{10}(r)Y_{00}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}R_{10}(r)$$

(ψ_0 已经归一化)有

$$E_0 = \int \psi_0^*(r)\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu} + V(r)\right)\psi_0(r)\,\mathrm{d}\tau$$

现在取基态试探波函数 $\psi(r,\beta)$ 为

$$\psi(r,\beta) = \sqrt{\frac{\beta^3}{\pi}}\mathrm{e}^{-\beta r}$$

($\psi(r,\beta)$ 已经归一化)，其中实数 $\beta > 0$ 为变分参量. 有

$$\begin{aligned}\overline{E(\beta)} &= \int \psi^*(r,\beta)\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu} + V(r)\right)\psi(r,\beta)\mathrm{d}\tau \\ &= \frac{\beta^3}{\pi}\iiint \mathrm{e}^{-\beta r}\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r)\right)\mathrm{e}^{-\beta r} r^2 \sin\theta \mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi \qquad (1) \\ &= \frac{\hbar^2\beta^2}{2\mu} + 4\beta^3\int_0^\infty r^2 V(r)\mathrm{e}^{-2\beta r}\mathrm{d}r\end{aligned}$$

由于体系处于真实基态 $\psi_0(r)$ 下，能量 E_0 必定最低，而对尝试波函数 $\psi(r,\beta)$ 的期望值 $\overline{E(\beta)}$，则不论实数 $\beta > 0$ 取值如何均有 $\overline{E(\beta)} \geqslant E_0$. 由 $\overline{E(\beta)} \leqslant 0$ 出发即可得出体系存在束缚定态的充分条件，具体如下.

由于

$$\overline{E(\beta)} = \frac{\hbar^2\beta^2}{2\mu} + 4\beta^3\int_0^\infty r^2 V(r)\mathrm{e}^{-2\beta r}\mathrm{d}r \leqslant 0$$

即

$$\beta\int_0^\infty r^2 |V(r)|\mathrm{e}^{-2\beta r}\mathrm{d}r \geqslant \frac{\hbar^2}{8\mu} \qquad (2)$$

适当选取式(1)中的变分参量 β，使得在最佳 β 值下 $\overline{E(\beta)}$ 取极小值. 故有

$$\overline{E(\beta)}_{\min} = \left[\beta^2\left(\frac{\hbar^2}{2\mu} + 4\beta\int_0^V r^2 V(r)\mathrm{e}^{-2\beta r}\mathrm{d}r\right)\right]_{\min} \leqslant 0$$

再由式(2)得到体系存在束缚态的充分条件为

$$\left[\beta\int_0^\infty r^2 |V(r)|\,\mathrm{e}^{-2\beta r}\mathrm{d}r\right]_{\max} \geqslant \frac{\hbar^2}{8\mu}$$

例　(1)

$$V(r) = -V_0\delta(r-a), \qquad V_0 > 0$$

因为

$$\beta\int_0^\infty r^2 |V(r)|\mathrm{e}^{-2\beta r}\mathrm{d}r = \beta\int_0^\infty r^2 V_0\delta(r-a)\,\mathrm{e}^{-2\beta r}\mathrm{d}r = \beta V_0 a^2\mathrm{e}^{-2\beta a}$$

再由 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\beta}\left(\beta V_0 a^2 \mathrm{e}^{-2\beta a}\right)=0$，得 $\beta=\frac{1}{2}a$ 时 $\left(V_0 a^2 \beta \mathrm{e}^{-2\beta a}\right)$ 的极大值

$$\left(V_0 a^2 \beta \mathrm{e}^{-2\beta a}\right)_{\max}\Big|_{\beta=\frac{1}{2}a}=\frac{V_0 a}{2e}$$

即

$$\frac{\mu V_0 a}{\hbar^2} \geqslant \frac{e}{4} \approx 0.68$$

体系存在束缚定态的必要条件是 $\frac{\mu V_0 a}{\hbar^2} \geqslant 0.5$，而精确计算的结果是 $\frac{\mu V_0 a}{\hbar^2} \geqslant 0.5$.

(2)

$$V(r)=-V_0 \mathrm{e}^{-r/a}, \quad V_0>0$$

$$\beta\int_0^{\infty} r^2 |V(r)| \mathrm{e}^{-2\beta r}\mathrm{d}r=\beta\int_0^{\infty} r^2 \mathrm{e}^{-(2\beta+1/a)r}\mathrm{d}r=\frac{2\beta V_0}{(2\beta+1/a)^3}$$

再由

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\beta}\cdot\frac{2\beta V_0}{(2\beta+1/a)^3}=0$$

知当 $\beta=\frac{1}{4a}$ 时 $\frac{2\beta V_0}{(2\beta+1/a)^3}$ 取得极大值

$$\left[\frac{2\beta V_0}{(2\beta+1/a)^3}\right]_{\max}=\frac{4V_0 a^2}{27}$$

故体系存在束缚态的充分条件为

$$\frac{4V_0 a^2}{27} \geqslant \frac{\hbar^2}{8\mu}$$

即

$$\frac{4V_0 a^2}{\hbar^2} \geqslant \frac{27}{32} \approx 0.84$$

体系存在束缚定态的必要条件为 $\frac{\mu V_0 a}{\hbar^2} \geqslant 0.5$，而精确计算的结果是 $\frac{\mu V_0 a}{\hbar^2} \geqslant 0.72$.

(3) Yukawa 势

$$V(r)=-V_0\frac{\mathrm{e}^{-r/a}}{r}, \quad V_0>0$$

因为

$$\beta\int_0^{\infty} r^2 |V(r)| \mathrm{e}^{-2\beta r}\mathrm{d}r=\beta\int_0^{\infty} r^2 V_0 \mathrm{e}^{-\left(\frac{1}{a}+2\beta\right)r}\mathrm{d}r=\frac{\beta V_0}{(2\beta+1/a)^2}$$

再由

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\beta}\left[\frac{\beta V_0}{(2\beta+1/a)^2}\right]=0$$

知 $\beta=\frac{1}{2a}$ 时，$\frac{\beta V_0}{(2\beta+1/a)^2}$ 取极大值

$$\left[\frac{\beta V_0}{\left(2\beta+1/a\right)^2}\right]_{\max}=\frac{V_0 a}{8}$$

故体系存在束缚态的充分条件是

$$\frac{V_0 a}{8}\geqslant\frac{\hbar^2}{8\mu},\qquad \text{即}\frac{\mu V_0 a}{\hbar^2}\geqslant 1$$

体系存在束缚定态的必要条件是$\frac{\mu V_0 a}{\hbar^2}\geqslant 0.5$，而数字计算的精确结果是$\frac{\mu V_0 a}{\hbar^2}\geqslant 0.84$.

(4)

$$V(r)=-V_0 e^{-r^2/a^2},\qquad V_0>0$$

取基态试探波函数

$$\psi(r,\beta)=\left(\frac{8\beta^6}{\pi^3}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\beta^2 r^2}$$

式中：实数$\beta>0$为变分参量，有

$$\begin{aligned}\overline{E}(\beta)&=\left\langle\psi(\beta)\right|\frac{p^2}{2\mu}+V(r)\left|\psi(\beta)\right\rangle\\&=\left(\frac{8\beta^6}{\pi^3}\right)^{\frac{1}{2}}\iiint e^{-\beta^2 r^2}\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(r)\right]e^{-\beta^2 r^2}r^2 dr\\&=\frac{3\hbar^2\beta^2}{2\mu}+\frac{8\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}}\beta^3\int_0^{\infty}r^2 V(r)\,e^{-2\beta^2 r^2}dr\end{aligned}$$

取

$$\overline{E}(\beta)=\frac{3\hbar^2\beta^2}{2\mu}+\frac{8\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}}\beta^3\int_0^{\infty}r^2 V(r)\,e^{-2\beta^2 r^2}dr\leqslant 0$$

即

$$\beta\int_0^{\infty}r^2\left|V(r)\right|e^{-2\beta^2 r^2}dr\geqslant\frac{3\sqrt{\pi}}{16\sqrt{2}}\cdot\frac{\hbar^2}{\mu}$$

上式左边等于

$$\beta\int_0^{\infty}r^2 V_0 e^{-r^2/a^2}e^{-2\beta^2 r^2}dr=\frac{V_0\sqrt{\pi}}{4}\cdot\frac{\beta}{\left(2\beta^2+1/a^2\right)^{3/2}}$$

再由上式对β求导等于零得出：当$\beta=\frac{1}{2a}$时，上式取得极大值$\frac{\sqrt{2\pi}}{12\sqrt{3}}V_0 a^2$，故体系存在束缚定态的必要条件是

$$\frac{\sqrt{2\pi}}{12\sqrt{3}}V_0 a^2\geqslant\frac{3\sqrt{\pi}}{16\sqrt{2}}\cdot\frac{\hbar^2}{\mu}$$

即

$$\frac{\mu V_0 a^2}{\hbar^2}\geqslant\frac{9\sqrt{3}}{8}\approx 1.94$$

体系存在束缚定态的必要条件是$\dfrac{\mu V_0 a^2}{\hbar^2}\geqslant 1$，而由数字计算得到的结果为$\dfrac{\mu V_0 a^2}{\hbar^2}\geqslant 1.34$.

3.55　氢原子定态波函数径向部分在动量表象中的形式

题 3.55　已知有心力场中运动的粒子，其定态波函数的径向部分由坐标表象变换到动量表象的变换关系为

$$f_{n,l}(p)=\sqrt{\frac{2}{\pi\hbar^3}}i^{-l}\int_0^\infty j_l\left(\frac{p}{\hbar}r\right)R_{n,l}(r)r^2\mathrm{d}r \tag{1}$$

式中：$f_{n,l}(p)$、$R_{n,l}(r)$ 分别为径向波函数在动量表象及坐标表象中的表示，$j_l\left(\frac{p}{\hbar}r\right)$ 为 l 阶的球 Bessel 函数. 试在动量表象中写出氢原子定态波函数的径向部分 $f_{n,l}(p)$ 的表达式.

解　将氢原子定态波函数中的径向部分 $R_{n,l}(r)$ 在坐标表象中的表达式

$$R_{n,l}(r)=N_{n,l}\mathrm{e}^{-\xi/2}\xi^l F(-n_r,2(l+1);\xi)$$

式中：F 函数为第一类合流超几何函数

$$N_{n,l}=\frac{2}{a_0^{3/2}(n_r+l+1)^2(2l+1)!}\sqrt{\frac{(n_r+2l+1)!}{n_r!}}$$

$$\xi=\frac{2}{(n_r+l+1)a_0}r$$

$$a_0=\frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{\mu e^2},\qquad n_r=0,1,2,\cdots;\ l=0,1,2,\cdots$$

代入变换关系式(1)中，即得 $f_{n,l}(p)$ 的表达式. 例如氢原子基态(1s 态)：$n_r=0$, $l=0$, $R_{00}(r)=\dfrac{2}{a_0^{3/2}}\mathrm{e}^{-r/a}$，则

$$f_{00}(p)=\sqrt{\frac{2}{\pi\hbar^3}}\int_0^\infty j_0\left(\frac{pr}{\hbar}\right)\frac{2}{a_0^{3/2}}\mathrm{e}^{-r/a}r^2\mathrm{d}r=\sqrt{\frac{8}{\pi\hbar^3a_0^3}}\int_0^\infty\frac{\sin(pr/\hbar)\mathrm{e}^{-r/a_0}}{pr/\hbar}r^2\mathrm{d}r$$

$$=\sqrt{\frac{32a_0^3}{\pi\hbar^3}}\cdot\frac{1}{\left[1+(a_0p/\hbar)^2\right]}$$

氢原子的 2s 态：$n_r=1$, $l=0$, $R_{10}(r)=\sqrt{\dfrac{1}{2a_0^3}}\left(1-\dfrac{r}{2a_0}\right)\mathrm{e}^{-r/2a_0}$，则

$$f_{10}(p)=\sqrt{\frac{2}{\pi\hbar^3}}\int_0^\infty j_0(pr/\hbar)\sqrt{\frac{1}{2a_0^3}}\left(1-\frac{r}{2a_0}\right)\mathrm{e}^{-r/2a_0}r^2\mathrm{d}r$$

$$=\sqrt{\frac{1}{\pi\hbar^3a_0^3}}\int_0^\infty\frac{\sin(pr/\hbar)}{pr/\hbar}\left(1-\frac{r}{2a_0}\right)\mathrm{e}^{-r/2a_0}r^2\mathrm{d}r$$

$$=\frac{32}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{a_0}{\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{4(a_0p/\hbar)^2-1}{\left[1+4(a_0p/\hbar)^2\right]^3}$$

氢原子的 2p 态；$n_r=2,\ l=1,\ R_{21}(r)=\dfrac{1}{2\sqrt{6}a_0^{3/2}}\dfrac{r}{a_0}\mathrm{e}^{-r/2a_0}$，则

$$
\begin{aligned}
f_{21}(p)&=\sqrt{\frac{2}{\pi\hbar^3}}i^{-1}\int_0^{\infty}j_l\left(\frac{p}{\hbar}r\right)R_{21}(r)r^2\mathrm{d}r\\
&=\sqrt{\frac{2}{\pi\hbar^3}}i^{-1}\int_0^{\infty}\left[\frac{\sin(pr/\hbar)}{(pr/\hbar)^2}-\frac{\cos(pr/\hbar)}{pr/\hbar}\right]\frac{1}{2\sqrt{6}a_0^{3/2}}\cdot\frac{r}{a_0}\mathrm{e}^{-r/2a_0}r^2\mathrm{d}r\\
&=-i\frac{128}{\sqrt{3}\pi}\sqrt{\frac{a_0}{\hbar}}\cdot\frac{(a_0p/\hbar)^2}{p[1+4(a_0p/\hbar)^2]^3}
\end{aligned}
$$

3.56 粒子在 Kratzer 分子势中运动束缚态解

题 3.56 粒子在中心力场(Kratzer 分子势)

$$
V(r)=-V_0\left(\frac{2a}{r}-\frac{a_0}{r^2}\right)
$$

中运动，式中$a>0,V_0>0$，它近似描述某些双原子分子中一个较轻的原子绕着另一个重得多的原子做振动和转动. 试求体系束缚态的能量($E>0$)和相应的定态波函数.

解 体系定态波函数$\psi_{n_rlm}(r,\theta,\varphi)=R_{n_rl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$，其中记径向函数为$R_{n_rl}=\dfrac{u(r)}{r}$，$u(r)$满足方程

$$
\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u+\left\{\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E+V_0\left(\frac{2a}{r}-\frac{a^2}{r^2}\right)\right]-\frac{l(l+1)}{r^2}\right\}u=0 \tag{1}
$$

作变量变换：$x=\dfrac{r}{a}$，并记

$$
\beta=\sqrt{\frac{2m(-E)a^2}{\hbar^2}}>0,\qquad \alpha=\sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}}>0
$$

则方程(1)写为

$$
\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}x^2}+\left[-\beta^2+\frac{2\alpha^2}{x}-\frac{\alpha^2+l(l+1)}{x^2}\right]u=0
$$

再记$\lambda=\dfrac{1}{2}+\sqrt{\alpha^2+(l+1/2)^2}$，取$u=x^{\lambda}\mathrm{e}^{-\beta x}f(x)$，则$f(x)$满足方程

$$
x\frac{\mathrm{d}^2f}{\mathrm{d}x^2}+(2\lambda-2\beta x)\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}+(-2\lambda\beta+2\alpha^2)f=0 \tag{2}
$$

再作变量变换：$y=2\beta x$，则方程变为合流超几何方程

$$
y\frac{\mathrm{d}^2f}{\mathrm{d}y^2}+(2\lambda-y)\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}y}-\left(\lambda-\frac{\alpha^2}{\beta}\right)f=0
$$

方程(2)在$r\to 0$有界的解为合流超几何级数

$$
f=F\left(\lambda-\frac{\alpha^2}{\beta},2\lambda;2\beta\frac{r}{a}\right)
$$

故体系定态波函数的径向函数为

$$R(r)=\left(\frac{r}{a}\right)^{\lambda-1}\mathrm{e}^{-\beta r/a}F\left(\lambda-\frac{\alpha^2}{\beta},2\lambda;\frac{2\beta}{\alpha}r\right)$$

注意到 $r\to\infty$ 处 $R(r)\to 0$，这要求合流超几何级数中断为多项式，有

$$\lambda-\frac{\alpha^2}{\beta}=-n_r,\qquad n_r=0,1,2,3,\cdots$$

由此确定体系束缚定态能级为

$$E_{n,l}=-\frac{\hbar^2}{2ma^2}\cdot\frac{\alpha^4}{(\lambda+n_r)^2}=-\frac{\hbar^2\alpha^4}{2ma^2}\left[\left(n_r+\frac{1}{2}\right)+\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2+\alpha^2}\right]^{-2}$$

式中

$$\alpha=\sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}}>0,\qquad n_r=0,1,2,3,\cdots,\qquad l=0,1,2,3,\cdots$$

对于大多数分子来说，$\alpha\gg 1$，故上面 $E_{n,l}$ 表示式可以按 $\frac{1}{\alpha}$ 的幂展开.

$$\begin{aligned}E_{n,l}&=-V_0\left[\frac{n_r+1/2}{\alpha}+\sqrt{\left(\frac{l+1/2}{\alpha}\right)^2+1}\right]^{-2}\\&=-V_0\left\{\frac{n_r+1/2}{\alpha}+1+\frac{1}{2}\left(\frac{l+1/2}{\alpha}\right)^2-\frac{1}{8}\left(\frac{l+1/2}{\alpha}\right)^4+\cdots\right\}^{-2}\\&=-V_0\left\{1-2\left[\frac{n_r+1/2}{\alpha}+\frac{1}{2}\left(\frac{l+1/2}{\alpha}\right)^2-\frac{1}{8}\left(\frac{l+1/2}{\alpha}\right)^4+\cdots\right]\right.\\&\qquad\left.+3\left[\frac{n_r+1/2}{\alpha}+\frac{1}{2}\left(\frac{l+1/2}{\alpha}\right)^2-\frac{1}{8}\left(\frac{l+1/2}{\alpha}\right)^4+\cdots\right]+\cdots\right\}\\&=V_0\left[-1+2\frac{(n_r+1/2)}{\alpha^3}+\frac{(l+1/2)^2}{\alpha^2}-\frac{3(l+1/2)^3}{\alpha^2}\right.\\&\qquad\left.-3\frac{(n_r+1/2)(l+1/2)^2}{\alpha^3}-\frac{(l+1/2)^4}{\alpha^4}+\cdots\right],\qquad n_r=0,1,2,\cdots;\ l=0,1,2,\cdots\end{aligned}\tag{3}$$

若将势能函数 $V(r)$ 在 $r=a$ 点附近展开

$$\begin{aligned}V(r)&=-V_0\left(\frac{2a}{r}-\frac{a^2}{r^2}\right)=-V_0+V_0\frac{[(r-a)/a]^2}{1+[1+(r-a)/a]^2}\\&=-V_0+V_0[(r-a_0)/a]^2\left\{1-2[(r-a)/a]+3[(r-a)/a]^2-\cdots\right\}\\&=-V_0+\frac{V_0}{a^2}(r-a)^2-\frac{2V_0}{a^3}(r-a)^3+\frac{3V_0}{a^4}(r-a)^4-\cdots\end{aligned}$$

可知道体系小振动的经典角频率 ω 为

$$\omega=\sqrt{\frac{k}{m}}=\sqrt{\frac{2V_0}{ma^2}}$$

又记体系的转动惯量 I 为

$$I = ma^2$$

代入体系能量 $E_{n,l}$ 表示式(3)中，得到

$$\begin{aligned} E_{n,l} = &-\frac{1}{2}I\omega^2 + \hbar\omega\left(n_r + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2}{2I}(l+\frac{1}{2})^2 - \\ &-\frac{3\hbar^2}{2I}\left(n_r + \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{3\hbar^2}{2\omega I^2}(n_r + 1/2)(l+\frac{1}{2})^2 - \cdots \end{aligned} \tag{4}$$

其中：$n_r = 0,1,2,\cdots$；$l = 0,1,2,\cdots$

从式(4)看出：第一项是常量；第二项是体系谐振动能量，其中 $n_r = 0,1,2,3,\cdots$ 第三项可以写为 $\frac{l(l+1)\hbar^2}{2I} + \frac{1}{4}\cdot\frac{\hbar^2}{2I}$，是体系转动惯量为常量 I 的转动能量，其中 $l = 0,1,2,3,\cdots$ 第四项表示由于势能函数 $V(r)$ 的非谐性带来对振动能量的修正(振动能量降低)；第五项表示由于势能函数 $V(r)$ 的非谐性所引起的振动与转动的耦合.

体系经典最低能量为 $-V_0 = -\frac{1}{2}I\omega^2$ (动能为零，势能取最低值)，即分子离解能为 $V_0 = \frac{1}{2}I\omega^2$；而按照量子力学，体系最低能量对应于 $n_r = 0$, $l = 0$ 的能量值

$$\begin{aligned} E_{0,0} &= -V_0\left[\frac{1}{2\alpha} + \sqrt{\left(\frac{1}{2\alpha}\right)^2 + 1}\right]^{-2} \\ &= -V_0\left\{\frac{1}{2\alpha} + \left[1 + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2\alpha}\right)^2 + \cdots\right]\right\}^{-2} \\ &= -\frac{1}{2}I\omega^2 + \left[\frac{1}{2}\hbar\omega - \frac{\hbar^2}{4I} - \frac{3\hbar^2}{16\omega I^2} + \cdots\right] \end{aligned}$$

即分子离解能为

$$\frac{1}{2}I\omega^2 - \left[\frac{1}{2}\hbar\omega - \frac{\hbar^2}{4I} - \frac{3\hbar^2}{16\omega I^2} + \cdots\right]$$

3.57 三维中心力场的“反散射”问题(1)

题 3.57 已知粒子在三维中心势场中运动，其束缚态径向波函数为

$$R_{n,l}(r) = \frac{u_{n,l}(r)}{r}$$

其中 $u_{n,l}(r)$ 为 (1) $Nr^2\mathrm{e}^{-\alpha r^2}$；(2) $A[\mathrm{e}^{-\alpha r} - \mathrm{e}^{-\beta r}]$ $(0 < \alpha < \beta)$，试分别求出体系的能量及粒子所处势场 $V(r)$.

解 (1) 由径向方程有

$$V(r)=E_{n,l}-\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}+\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{u_{n,l}(r)}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u_{n,l}(r),\qquad r\geqslant 0$$

可知

$$\frac{1}{u_{n,l}(r)}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u_{n,l}(r)=\frac{2}{r^2}-10\alpha+4\alpha^2r^2$$

故

$$V(r)=E_{n,l}-\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}+\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{2}{r^2}-10\alpha+4\alpha^2r^2\right)$$
$$=E_{n,l}-\frac{5\alpha\hbar^2}{\mu}-\frac{(l+2)(l-1)\hbar^2}{2\mu r^2}+\frac{2\alpha^2\hbar^2}{\mu}r^2$$

若$l=0, E=\frac{5\alpha\hbar^2}{\mu}$，$V(r)=\frac{2\alpha^2\hbar^2}{\mu}r^2+\frac{\hbar^2}{\mu r^2}$. 记$\alpha=\frac{\mu\omega}{2\hbar}$，则

$$E=\frac{5}{2}\hbar\omega,\qquad V(r)=\frac{1}{2}\mu\omega^2r^2+\frac{\hbar^2}{\mu r^2}$$

若$l=1$，则

$$E=\frac{5}{2}\hbar\omega,\quad V(r)=\frac{1}{2}\mu\omega^2r^2$$

等.

(2) 若$l=0$，有

$$V(r)=E+\frac{\hbar^2[\alpha^2\mathrm{e}^{-\alpha r}-\beta^2\mathrm{e}^{-\beta r}]}{2\mu[\mathrm{e}^{-\alpha r}-\mathrm{e}^{-\beta r}]}$$

再设定$V(r)$的零点为$V(r)\xrightarrow{r\to\infty}0$，有

$$0=E+\frac{\hbar^2\alpha^2}{2\mu},\qquad 因为\alpha<\beta$$

得到

$$E=-\frac{\hbar^2\alpha^2}{2\mu}$$

$$V(r)=\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{(\alpha^2-\beta^2)\mathrm{e}^{-\beta r}}{\mathrm{e}^{-\alpha r}-\mathrm{e}^{-\beta r}}$$

当r很小时，有

$$V(r)\sim\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{(\alpha^2-\beta^2)\mathrm{e}^{-\beta r}}{(\beta-\alpha)r}=-\frac{\hbar^2(\alpha+\beta)\mathrm{e}^{-\beta r}}{2\mu r}$$

为受屏蔽的 Coulomb 势场.

3.58 三维中心力场的“反散射”问题(2)

题 3.58 设一质点波函数$\psi(r,\theta,\varphi)=A\mathrm{e}^{-r/a_0}$，其中$A$和$a_0$均为常数，试求：(1) 这个态的角动量如何? (2) 设其为一定态，且当$r\to\infty$时，$V(r)\to 0$，求此定态的能量E和势函数$V(r)$.

解 (1)由于L^2, L_x, L_y, L_z仅与θ,φ有关，而ψ与θ,φ无关，故

$$L^2\psi = 0, \quad L_z\psi = 0, \quad L_x\psi = 0, \quad L_y\psi = 0$$

即这个态的角动量及其各分量均为零，实际上$\psi(r,\theta,\varphi) = \sqrt{4\pi}Ae^{-\frac{r}{a_0}}Y_{00}(\theta,\varphi)$.

(2) 有定态 Schrödinger 方程$H\psi = E\psi$，在球坐标系中

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{r^2}\cdot\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2}\right) + V(r)$$

所以

$$[E - V(r)]\psi = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{r^2}\cdot\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2}\right)\psi$$

由(1)中讨论可知

$$l = 0, \quad V(r) - E = \frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2}\left(1 - \frac{2a_0}{r}\right)$$

由$r \to \infty$时，$V(r) = 0$得

$$E = -\frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2}, \quad V(r) = -\frac{\hbar^2}{\mu a_0 r}$$

3.59 一维氢原子的束缚态解

题 3.59 一维氢原子$V(x) = -\frac{e^2}{|x|}$，求其$E < 0$的束缚态能级和波函数.

解 由于$V(x)$具有空间反演对称性，故能量本征态有确定宇称，可以求解$x > 0$区域中的解，便可确定能量本征值，而$x < 0$区域中的解，可由宇称性写出在$x > 0$区

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{d^2}{dx^2} - \frac{e^2}{x}\right]\psi = E\psi \tag{1}$$

令$k^2 = -\frac{2\mu E}{\hbar^2}, A = \frac{2\mu e^2}{\hbar^2}$，有

$$\psi(x) = xe^{-kx}\theta(x)$$

代入式(1)，得到

$$x\theta''(x) + (2 - 2kx)\theta'(x) + (A - 2k)\theta = 0 \tag{2}$$

作变换，令$y = 2kx$，式(2)变为

$$y\theta'' + (2 - y)\theta' - \left(1 - \frac{A}{2k}\right)\theta = 0 \tag{3}$$

式(3)在$y = 0$处有界解为合流超几何函数

$$\theta(y) = F\left(1 - \frac{A}{2k}, 2, y\right)$$

由束缚态边界条件有

$$\frac{A}{2k} = n, \quad n = 1,2,3,\cdots$$

得

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2 n^2}, \quad n = 1,2,3,\cdots$$

相应的偶宇称态

$$\psi_{+,n}(x) = c|x| e^{-\frac{\mu e^2}{n\hbar^2}|x|} F\left(1-n, 2, \frac{2\mu e^2}{n\hbar^2}|x|\right)$$

奇宇称态

$$\psi_{-,n}(x) = cx e^{-\frac{\mu e^2}{n\hbar^2}|x|} F\left(1-n, 2, \frac{2\mu e^2}{n\hbar^2}|x|\right)$$

其中$\psi_{+,n}(x)$, $\psi_{-,n}(x)$线性无关，所以能级是二重简并的.

注 一般情况下，一维束缚定态无简并，但本题中势能在$x=0$处发散，因此，出现了能级简并.

另外，可利用一维氢原子与三维氢原子 s 态所满足径向方程及边界条件的一致性求解此问题.

3.60 氢原子 1s, 2s, 2p 态在动量表象中的形式

题 3.60 求氢原子 1s, 2s, 2p 态在动量表象中的波函数.

解 $\psi(\boldsymbol{r})$的 Fourier 变换为

$$\varphi(\boldsymbol{p}) = F[\psi(\boldsymbol{r})] = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} \int \psi(\boldsymbol{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}} d^3 r$$

因为$\psi_{1s}(\boldsymbol{r}) = \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}}$，取$\boldsymbol{p}$沿$z$轴方向，则

$$\begin{aligned}\varphi_{1s}(\boldsymbol{p}) &= \frac{1}{\pi^2 (2\hbar a_0)^{\frac{3}{2}}} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} e^{-\frac{i}{\hbar} pr\cos\theta} e^{-\frac{r}{a_0}} r^2 \sin\theta \mathrm{d}r \mathrm{d}\theta \mathrm{d}\varphi \\ &= \frac{1}{\pi}\left(\frac{2a_0}{\hbar}\right)^{3/2} \frac{1}{\left(1 + p^2 a_0^2/\hbar^2\right)^2}\end{aligned}$$

同样的，有

$$\varphi_{2s}(\boldsymbol{p}) = \frac{1}{2\pi}\left(\frac{2a_0}{\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{p^2 a_0^2}{\hbar^2} + \frac{1}{4}\right)^{-3} \left(\frac{p^2 a_0^2}{\hbar^2} - \frac{1}{4}\right)$$

对于态 2p，$m = -1,0,1$，于是

当$m=0$时

$$\varphi_{2p}(\boldsymbol{p}) = -\frac{i}{\pi}\left(\frac{a_0}{\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{p^2 a_0^2}{\hbar^2} + \frac{1}{4}\right)^{-3} \frac{a_0 p_z}{\hbar}$$

当$m = \pm 1$时

$$\varphi_{2p}(\boldsymbol{p})=\frac{-\mathrm{i}}{\sqrt{2}\pi}\left(\frac{a_0}{\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{p^2a_0^2}{\hbar^2}+\frac{1}{4}\right)^{-3}\frac{a_0(p_x\pm \mathrm{i}p_y)}{\hbar}$$

3.61 氢原子中电子的电矩

题 3.61 已知描述氢原子中电子运动状态的三种可能波函数在球坐标系中可以写为

$$\psi_1=A\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}r}(r-2),\qquad \psi_2=A\mathrm{e}^{-\frac{r}{2}}r\cos\theta,\qquad \psi_3=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1+\psi_2)$$

其中ψ_1，ψ_2已经正交归一化，常数$A>0$，证明ψ_1和ψ_2态的电矩为零，求出ψ_3态电矩的表达式，并指出矩的取向.

证明 因为$\boldsymbol{D}=-e\boldsymbol{r}$

$$\langle \boldsymbol{D}\rangle=-e\int\psi^*\boldsymbol{r}\psi\mathrm{d}\boldsymbol{r}=-e\langle \boldsymbol{r}\rangle=-e\left[\langle x\rangle\boldsymbol{i}+\langle y\rangle\boldsymbol{j}+\langle z\rangle\boldsymbol{k}\right]$$

$$\langle x\rangle_1=\iiint|\psi_1|^2r^3\sin^2\theta\cos\varphi\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi$$

$$=\int_0^\infty|\psi_1|^2r^3\mathrm{d}r\int_0^\pi\sin^2\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\cos\varphi\mathrm{d}\varphi=0$$

$$\langle y_1\rangle=\int_0^\infty|\psi_1|^2r^3\mathrm{d}r\int_0^\pi\sin^2\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\sin\varphi\mathrm{d}\varphi=0$$

$$\langle z_1\rangle=\int_0^\infty|\psi_1|^2r^3\mathrm{d}r\int_0^\pi\sin\theta\cos\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi=0$$

所以$\langle \boldsymbol{D}\rangle_1=0$，同理$\langle \boldsymbol{D}\rangle_2=0$.

这一结果，可以由对称性考虑直接给出，因为$\boldsymbol{D}$为奇宇称算符，$|\psi_1\rangle$为偶宇称态，$|\psi_2\rangle$为奇宇称态

$$\langle x\rangle_3=\int_0^\infty|\psi_3|^2r^3\mathrm{d}r\int_0^\pi\sin^2\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\cos\varphi\mathrm{d}\varphi=0$$

$$\langle y\rangle_3=\int_0^\infty|\psi_3|^2r^3\mathrm{d}r\int_0^\pi\sin^2\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\sin\varphi\mathrm{d}\varphi=0$$

$$\langle z\rangle_3=\frac{1}{2}\int(\psi_1+\psi_2)^*z(\psi_1+\psi_2)\mathrm{d}^3r=\int\psi_1^*z\psi_2\mathrm{d}^3r$$

$$=A^2\int\mathrm{e}^{-r}(r-2)r^3\mathrm{d}r\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int_0^\pi\cos^2\sin\theta\mathrm{d}\theta=16\pi A^2$$

$$\langle \boldsymbol{D}\rangle_3=-16\pi A^2e\boldsymbol{k}$$

电矩沿z轴.

3.62 刚性球半径突变时处于球内的粒子

题 3.62 在半径为R的硬刚性球内，有一质量为m的粒子处于基态，现突然将硬刚性球半径扩展为原来的 2 倍，求扩展后系统中的粒子处于基态的概率.

解 处于半径为R的硬刚性球内运动粒子的基态

$$\psi_0(r,\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{2}{R}}\frac{1}{r}\sin\frac{\pi}{R}rY_{00},\qquad r<R$$

而半径为 $2R$ 的刚性球中粒子的基态

$$\varphi_0(r,\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{1}{R}}\cdot\frac{1}{r}\sin\frac{\pi r}{2R}Y_{00}$$

故粒子处于基态的概率

$$\rho=\left|\langle\varphi_0|\psi_0\rangle\right|^2$$

$$\left|\langle\varphi_0|\psi_0\rangle\right|=\frac{\sqrt{2}}{R}\int_0^R\sin\frac{\pi r}{R}\sin\frac{\pi r}{2R}\mathrm{d}r$$

$$=\sqrt{2}\left[\left.\frac{\sin\left(\pi-\dfrac{\pi}{2}\right)\dfrac{r}{R}}{2\left(\pi-\dfrac{\pi}{2}\right)}\right|_0^R-\left.\frac{\sin\left(\pi+\dfrac{\pi}{2}\right)\dfrac{r}{R}}{2\left(\pi+\dfrac{\pi}{2}\right)}\right|_0^R\right]=\frac{4\sqrt{2}}{3\pi}$$

$$\rho=\frac{32}{9\pi^2}$$

3.63　粒子在 Hulthen 势中束缚态能级的不等式

题 3.63　粒子在 Hulthen 势场

$$V(r)=\frac{-V_0}{\mathrm{e}^{r/a}-1},\qquad V_0,a>0$$

中运动，证明束缚态能级 E_n 满足不等式

$$E_n>\frac{-\mu V_0^2a^2}{2n^2\hbar^2},\qquad n=1,2,3,\cdots \tag{1}$$

证明　和类氢粒子能级公式比较，可以看成式(1)右端正好是 Coulomb 场

$$V_C(r)=-\frac{V_0a}{r}$$

的束缚态能级. 将 $V(r)$ 和 $V_c(r)$ 加以比较，易得

$$V(r)=-V_0\left[\frac{r}{a}+\frac{1}{2!}\left(\frac{r}{a}\right)^2+\cdots\right]^{-1}=V_C(r)\left[1+\frac{1}{2!}\left(\frac{r}{a}\right)+\frac{1}{3!}\left(\frac{r}{a}\right)^2+\cdots\right]^{-1}$$

可见

$$|V(r)|<|V_C|,\qquad V(r)>V_C(r)$$

根据题 3.62，$V(r)$ 场的每个能级均应该高于 $V_C(r)$ 场的相应能级，故不等式(1)成立.

3.64　无自旋粒子在柱对称势下运动的讨论

题 3.64　无自旋粒子在柱对称势 $V(\rho)$ 作用下运动(柱坐标记号为 ρ,φ,z)，(1) 证明 $[H,L_z]=[H,p_z]=0$，写出径向定态方程. (2) 设 π_y 描述 Zoy 平面反射，则 π_y 与 H 是否对

易？证明$\left[\pi_y, L_z\right]_+=0$，从而$\{H, L_z, p_z\}$的共同本征矢在$\pi_y$的作用下，仍为$L_z$的本征矢. 这对能级简并度有什么影响？

证明 (1) 由

$$H=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\cdot\frac{\partial}{\partial\rho}\right)+\frac{L_z^2}{2\mu\rho^2}+\frac{p_z^2}{2\mu}+V(\rho)$$

可得

$$\left[H, p_z\right]=\left[H, L_z\right]=0$$

令 $\psi(\rho,\varphi,z)=f(\rho)\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}$，得到

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}+\frac{1}{\rho}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\right)+\frac{m^2\hbar^2}{2\mu\rho^2}+\frac{\hbar^2k^2}{2\mu}+V(\rho)\right]f(\rho)=Ef(\rho)$$

(2) 在π_y作用下，$\varphi\to 2\pi-\varphi$，ρ及z不变，因而∇^2不变，从而H不变，即$\pi_y H\pi_y^{\dagger}=H$，因$\pi_y^{\dagger}=\pi_y^{-1}$，得$\left[\pi_y, H\right]=0$. 另一方面，$\frac{\partial}{\partial\varphi}\to-\frac{\partial}{\partial\varphi}$，即$L_z=-L_z$. 由于$\pi_y L_z\pi_y^{\dagger}=-L_z$，得$\left[\pi_y, L_z\right]_+=0$，由此$\pi_y\psi_{nmk}=\psi_{n,-m,k}$，它导致对$m$的二重简并存在($m=0$除外).

第 4 章　轨道及自旋角动量问题

4.1　角动量的对易关系

题 4.1　$\boldsymbol{J}$ 为角动量算符，$\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J}=i\hbar\boldsymbol{J}$，即 $[J_\alpha,J_\beta]=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}J_\gamma$，$\alpha,\beta,\gamma=1,\ 2,\ 3$．若 $\boldsymbol{m}$ 和 $\boldsymbol{n}$ 为任意方向的矢量，皆与 $\boldsymbol{J}$ 对易，证明：(1) $[\boldsymbol{J},\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}]=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J}$；(2) $[\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{m},\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}]=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{J}\cdot(\boldsymbol{m}\times\boldsymbol{n})$　(3) $[J^2,J_n]=0$.

证明　下列公式在证明过程中是有用的

$$\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\alpha B_\beta\boldsymbol{e}_\gamma$$

$$\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\alpha B_\beta C_\gamma$$

(1) $[\boldsymbol{J},\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}]=\boldsymbol{e}_\alpha[\boldsymbol{J}_\alpha,\boldsymbol{J}_\beta]\boldsymbol{n}_\beta=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\boldsymbol{e}_\alpha\boldsymbol{J}_\gamma\boldsymbol{n}_\beta=-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{n}=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J}$

(2) $[\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{m},\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}]=[\boldsymbol{J}_\alpha,\boldsymbol{J}_\beta]\boldsymbol{m}_\alpha\boldsymbol{n}_\beta=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\boldsymbol{J}_\gamma\boldsymbol{m}_\alpha\boldsymbol{n}_\beta=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{J}\cdot(\boldsymbol{m}\times\boldsymbol{n})$

(3) $[\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{J}_n]=[\boldsymbol{J}_\alpha\boldsymbol{J}_\alpha,\boldsymbol{J}_\beta]\boldsymbol{n}_\beta=[\boldsymbol{J}_\alpha,\boldsymbol{J}_\beta]\boldsymbol{J}_\alpha\boldsymbol{n}_\beta+\boldsymbol{J}_\alpha[\boldsymbol{J}_\alpha,\boldsymbol{J}_\beta]\boldsymbol{n}_\beta$

$$=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}(\boldsymbol{J}_\gamma\boldsymbol{J}_\alpha\boldsymbol{J}_\beta+\boldsymbol{J}_\alpha\boldsymbol{J}_\gamma\boldsymbol{J}_\beta)=\mathrm{i}\hbar[\boldsymbol{J}\cdot(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{n})-\boldsymbol{J}\cdot(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{n})]=0$$

4.2　角动量的升降算符

题 4.2　$\boldsymbol{J}$ 为角动量算符 $\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J}=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{J}$；定义升降算符 $\boldsymbol{J}_\pm=\boldsymbol{J}_x\pm\mathrm{i}\boldsymbol{J}_y$，$|j,m_j\rangle$ 为 J^2，J_z 的共同本征态，证明 $\boldsymbol{J}_\pm|j,m_j\rangle=[j(j+1)-m_j(m_j\pm1)]^{1/2}\hbar|j,m_j\pm1\rangle$

证明　分二步，先证 $J_\pm|j,m_j\rangle$ 是 J^2，J_z 的本征值分别为 $j(j+1)\hbar^2$，$(m_j\pm1)\hbar$ 的本征态.由于 $[J^2,J_z]=0$，所以

$$J^2J_\pm|j,m_j\rangle=J_\pm J^2|j,m_j\rangle=j(j+1)\hbar^2J_\pm|j,m_j\rangle$$

另外，由于 $[J_z,J_\pm]=\pm\hbar J_\pm$，所以

$$J_zJ_\pm|j,m_j\rangle=J_\pm(J_z\pm\hbar)|j,m_j\rangle=(m_j\pm1)\hbar J_\pm|j,m_j\rangle$$

所以 $J_\pm|j,m_j\rangle$ 是 J^2 本征值为 $j(j+1)\hbar^2$，J_z 的本征值为 $(m_j\pm1)\hbar$ 的共同本征态. 所以

$$J_\pm|j,m_j\rangle=g_\pm|j,m_j\pm1\rangle$$

再求 $g_\pm$，由 $J_\pm|j,m_j\rangle=g_\pm|j,m_j\pm1\rangle$，作内积

$$|g_+|^2=\langle j,m_j|J_-J_+|j,m_j\rangle$$

由于 $J_-J_+=J^2-J_z^2-\hbar J_z$，有

$$|g_+|^2=[j(j+1)-m_j(m_j+1)]\hbar^2,\qquad g_+=[j(j+1)-m_j(m_j+1)]^{1/2}\hbar$$

即

$$J_+\left|j,m_j\right\rangle=\left[j(j+1)-m_j\left(m_j+1\right)\right]^{1/2}\hbar\left|j,m_j+1\right\rangle$$

同理有

$$J_-\left|j,m_j\right\rangle=\left[j(j+1)-m_j\left(m_j-1\right)\right]^{1/2}\hbar\left|j,m_j-1\right\rangle$$

4.3　在 J^2、J_z 的共同本征态 $\left|j,m_j\right\rangle$ 下，求 $\left\langle J_x\right\rangle$、$\left\langle J_x^2\right\rangle$ 及 ΔJ_x

题 4.3　$\left|j,m_j\right\rangle$ 为 J^2、J_z 的共同本征态，证明在该态下：(1) $\left\langle J_x\right\rangle=\left\langle J_y\right\rangle=0$; (2) $\left\langle J_x^2\right\rangle=\left\langle J_y^2\right\rangle=\frac{1}{2}\left[j(j+1)-m_j^2\right]\hbar^2$;(3) $\Delta J_x\cdot\Delta J_y=\frac{1}{2}\left[j(j+1)-m_j^2\right]\hbar^2$.

证明　(1) $\left[J_y,J_z\right]=\mathrm{i}\hbar J_x$，由于 $\left\langle j,m_j\right|\left[J_y,J_z\right]\left|j,m_j\right\rangle=0$，所以在 $\left|j,m_j\right\rangle$ 态下 $\left\langle J_x\right\rangle=0$，同理 $\left\langle J_y\right\rangle=0$.

(2) **证法一**　由于

$$\mathrm{i}\hbar J_x^2=\left[J_y,J_z\right]J_x=J_y\left(J_xJ_z+\mathrm{i}\hbar J_y\right)-J_zJ_yJ_x=\mathrm{i}\hbar J_y^2+J_yJ_xJ_z-J_zJ_yJ_x$$

上式在 $\left|j,m_j\right\rangle$ 态下求平均时，后两项贡献互抵，因此

$$\left\langle J_x^2\right\rangle=\left\langle J_y^2\right\rangle$$

由于

$$\left\langle J_x^2+J_y^2\right\rangle=\left\langle J^2-J_z^2\right\rangle=\left[j(j+1)-m_j^2\right]\hbar^2$$

所以

$$\left\langle J_x^2\right\rangle=\left\langle J_y^2\right\rangle=\frac{1}{2}\left[j(j+1)-m_j^2\right]\hbar^2$$

证法二　$J_x=\frac{1}{2}(J_++J_-)$，　$J_x^2=\frac{1}{4}\left(J_+^2+J_-^2+J_+J_-+J_-J_+\right)$

上式在 $\left|j,m_j\right\rangle$ 态下求平均时，右边前两项贡献为零，且

$$J_+J_-+J_-J_+=2\left(J^2-J_z^2\right)$$

所以

$$\left\langle J_x^2\right\rangle=\frac{1}{2}\left[j(j+1)-m_j^2\right]\hbar^2$$

(3) 由(1)、(2)有

$$\Delta J_x=\Delta J_y=\left\langle J_x^2\right\rangle^{1/2}=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\left[j(j+1)-m_j^2\right]^{1/2}$$

$$\Delta J_x\cdot\Delta J_y=\frac{\hbar^2}{2}\left[j(j+1)-m_j^2\right]$$

4.4　在 J^2、J_z 共同本征态 $|j,m_j\rangle$ 下，求 $\langle J_n\rangle$、$\langle J_n^2\rangle$

题 4.4　$\boldsymbol{J}$ 为角动量算符，$\boldsymbol{n}$ 为 θ,φ 方向单位矢量. $|j,m_j\rangle$ 是 J^2,J_z 的共同本征态，在该态下求 (1) $\langle \boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}\rangle=\langle J_n\rangle$；(2) $\langle J_n^2\rangle$；(3) J_x 与 J_y 的任何奇次幂式的平均值皆为零.

解　(1)
$$\langle J_n\rangle=n_x\langle J_x\rangle+n_y\langle J_y\rangle+n_z\langle J_z\rangle=n_z m_j\hbar=m_j\hbar\cos\theta$$

(2)
$$J_n^2=\left(n_x^2J_x^2+n_y^2J_y^2+n_z^2J_z^2\right)+n_xn_y\left(J_xJ_y+J_yJ_x\right)+n_xn_z\left(J_xJ_z+J_zJ_x\right)+n_yn_z\left(J_yJ_z+J_zJ_y\right)\quad(1)$$

另外
$$J_xJ_y+J_yJ_x=\frac{1}{2i}\left(J_+^2-J_-^2\right)$$

因式(1)在 $|j,m_j\rangle$ 态下求平均时，只有右边第一个括号有贡献
$$\langle J_n^2\rangle=\frac{\hbar^2}{2}\left[j(j+1)-m_j^2\right]\sin^2\theta+m_j^2\hbar^2\cos^2\theta$$

(3) 因为 J_x,J_y 的奇次幂式 $\left(J_x^3,J_x^2J_y,\cdots\right)$ 均可表示为 J_+，J_- 的奇次幂式，而后者作用于 $|j,m_j\rangle$ 时，将得到各种 $|j,m_j'\rangle$，且 $m_j'-m_j=$ 奇数，即 $m_j'\neq m_j$，所以
$$\langle j,m_j|J_x,J_y\text{的奇次幂}|j,m_j\rangle=0$$

4.5　在 J^2、J_z 表象的 $j=1$ 的子空间，J_x、J_y 的矩阵表示及本征值与本征态

题 4.5　在 J^2、J_z 表象的 $j=1$ 的子空间中：(1) 求 J_+,J_-,J_x,J_y,J_n 的矩阵表示；(2) 求 J_x,J_y 的本征值和本征态.

解　(1) J^2、J_z 表象基为

因为
$$Y_{11}=\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix},\qquad Y_{10}=\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix},\qquad Y_{1-1}=\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$$

$$J_\pm|j,m_j\rangle=\left[j(j+1)-m_j(m_j\pm1)\right]^{1/2}\hbar|j,m_j\pm1\rangle$$
$$\langle j,m_j|J_+|j,m_j'\rangle=\left[j(j+1)-m_j(m_j+1)\right]^{1/2}\hbar\delta_{m_j,m_j'+1}$$

对于 $j=1$ 的情况，$m_j,m_j'=1,\ 0,\ -1$，$(J_+)_{m_jm_j'}$ 不为零的矩阵元为 $(J_+)_{1,0}=(J_+)_{0,-1}=\sqrt{2}\hbar$. 故
$$J_+=\sqrt{2}\hbar\begin{pmatrix}0&1&0\\0&0&1\\0&0&0\end{pmatrix},\qquad J_-=J_+^\dagger=\sqrt{2}\hbar\begin{pmatrix}0&0&0\\1&0&0\\0&1&0\end{pmatrix}$$

$$J_x=\frac{1}{2}(J_++J_-)=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix},\qquad J_y=\frac{1}{2\mathrm{i}}(J_+-J_-)=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}&0\\\mathrm{i}&0&-\mathrm{i}\\0&\mathrm{i}&0\end{pmatrix}$$

$$J_n=\sin\theta\cos\varphi J_x+\sin\theta\sin\varphi J_y+\cos\theta J_z$$

$$=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}\sqrt{2}\cos\theta&\sin\theta\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}&0\\\sin\theta\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}&0&\sin\theta\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\\0&\sin\theta\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}&-\sqrt{2}\cos\theta\end{pmatrix}$$

(2) 由久期方程，可求出 J_x,J_y,J_n 的本征值皆为 $\hbar$, 0, $-\hbar$，由 J_x，J_y 的本征方程，解出相应的本征态

$$\phi_{11}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\\sqrt{2}\\1\end{pmatrix},\quad J_x=\hbar,\qquad \phi_{10}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\\-1\end{pmatrix},\quad J_x=0$$

$$\phi_{1,-1}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\-\sqrt{2}\\1\end{pmatrix},\quad J_x=-\hbar,\qquad \theta_{11}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\\sqrt{2}\mathrm{i}\\1\end{pmatrix},\quad J_y=\hbar,$$

$$\theta_{10}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\\1\end{pmatrix},\quad J_y=0,\qquad \theta_{1,-1}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\-\sqrt{2}\mathrm{i}\\1\end{pmatrix},\quad J_y=-\hbar$$

4.6 在 $j=1$ 的子空间中，证明 $J_x^3=J_x$

题 4.6 在 $|j,m_j\rangle$ 态矢量空间的 $j=1$ 的子空间中，取 $\hbar=1$，(1) 证明 $J_x^3=J_x$；(2) 证明 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta J_x}=1+\mathrm{i}J_x\sin\theta-J_x^2(1-\cos\theta)$.

证明 (1) 在 $j=1$ 的子空间中，J^2、J_x 的本征态 $|\phi_{1m}\rangle$ ($m=1$, 0, -1)，是一组完备基，即对任意 $|\psi\rangle$

$$|\psi\rangle=C_1|\phi_{11}\rangle+C_0|\phi_{10}\rangle+C_{-1}|\phi_{1-1}\rangle$$

均有

$$(J_x-1)(J_x-0)(J_x+1)|\psi\rangle=0$$

即

$$\left(J_x^3-J_x\right)|\psi\rangle=0$$

因为 $|\psi\rangle$ 是任意的，所以有 $J_x^3=J_x$.这一结果对 $\boldsymbol{J}$ 在任何方向 $\boldsymbol{n}$ 的投影 J_n 亦成立.

(2) **证法一**

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta J_x}=1+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(\mathrm{i}\theta)^n}{n!}J_x^n$$

$$=1+J_x\left[\mathrm{i}\theta+\frac{(\mathrm{i}\theta)^3}{3!}+\frac{(\mathrm{i}\theta)^5}{5!}+\cdots\right]+J_x^2\left[\frac{(\mathrm{i}\theta)^2}{2!}+\frac{(\mathrm{i}\theta)^4}{4!}+\frac{(\mathrm{i}\theta)^6}{6!}+\cdots\right]$$

$$=1+\mathrm{i}J_x\left[\theta-\frac{\theta^3}{3!}+\frac{\theta^5}{5!}+\cdots\right]+J_x^2\left[-\frac{\theta^2}{2!}+\frac{\theta^4}{4!}-\frac{\theta^6}{6!}+\cdots\right]$$

$$=1+\mathrm{i}J_x\sin\theta-J_x^2(1-\cos\theta)$$

证法二　由线性代数中的 Hamilton-Cayley 定理，在 $j=1$ 的子空间中 J_x 为 3×3 方阵，故 J_x 的任意整函数 $f(J_x)$ 可表示为 I,J_x,J_x^2 的线性组合，令

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta J_x}=C_0+C_1J_x+C_2J_x^2$$

让上式作用至 $J_x=1,\ 0,\ -1$ 的本征态上有

$$\begin{cases}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}=C_0+C_1+C_2\\ 1=C_0\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta}=C_0-C_1+C_2\end{cases}$$

联立求解有

$$C_0=1,\qquad C_1=\frac{1}{2}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta}\right)=\mathrm{i}\sin\theta,\qquad C_2=-(1-\cos\theta)$$

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta J_x}=1+\mathrm{i}J_x\sin\theta-(1-\cos\theta)J_x^2$$

4.7　在 J^2、J_z 共同本征态 $|j,m\rangle$ 中，J_x、J_y 取 $\pm m'\hbar$ 的概率相同

题 4.7　对 J^2、J_z 的共同本征态 $|jm\rangle$，证明对于任何 m' 值($m'=j,j-1,\cdots,-j$)，J_x，J_y 取各种本征值 $\pm m'\hbar$ 的概率 $W_{\pm m'}$ 相等.

解　设在 $|jm\rangle$ 态中测得 $J_x=\pm m'$ 的概率为 $W(\pm m')$，下面证明 $W(m')=W(-m')$.

若 j 为正整数，作 J_x 的奇次式

$$f(J_x)=J_x\left(J_x^2-1^2\right)\left(J_x^2-2^2\right)\cdots\left(J_x^2-j^2\right)$$

其中不含因子 $\left(J_x^2-m'^2\right)$，则

$$f(m')=-f(-m')\neq 0,\qquad f(m)=0,\qquad m\neq\pm m'$$

由于在 $|jm\rangle$ 态下，$f(J_x)$ 平均值为零，因此

$$\langle f(J_x)\rangle=\sum_m f(m)W(m)=f(m')\left[W(m')-W(-m')\right]=0$$

所以

$$W(m')=W(-m')$$

若 j 为半奇数，作 J_x 的奇次式

$$f(J_x)=J_x\left[J_x^2-\left(\frac{1}{2}\right)^2\right]\left[J_x^2-\left(\frac{3}{2}\right)^2\right]\cdots\left[J_x^2-j^2\right]$$

其中不含因子 $\left(J_x^2-m'^2\right)$，仍可证明 $W(m')=W(-m')$.

最后证明在 $|jm\rangle$ 态下，测得 $J_x=m'$ 的概率等于测得 $J_y=m'$ 的概率.

对于给定的 j，$J_x = m'$ 的本征态为

$$|J_x = m'\rangle = e^{\frac{i\pi}{2}J_y}|jm'\rangle$$

其中 $e^{-\frac{i\pi}{2}J_y}$ 为体系绕 y 轴转动 $\frac{\pi}{2}$ 的转动算符，而 $J_y = m'$ 的本征态为

$$|J_y = m'\rangle = e^{-\frac{i\pi}{2}J_z} e^{-\frac{i\pi}{2}J_y}|jm'\rangle$$

故在 $|jm\rangle$ 态下测得 $J_y = m'$ 的概率为

$$W(J_y = m') = \left|\left\langle jm\left|e^{-\frac{i\pi}{2}J_z} e^{-\frac{i\pi}{2}J_y}\right|jm'\right\rangle\right|^2 = \left|e^{-\frac{im\pi}{2}}\left\langle jm\left|e^{-\frac{i\pi}{2}J_y}\right|jm'\right\rangle\right|^2$$

$$= \left|\left\langle jm\left|e^{-\frac{i\pi}{2}J_y}\right|jm'\right\rangle\right|^2 = W(J_x = m')$$

同样可证，对任何垂直于 z 轴方向 $\boldsymbol{n}$ $(\theta_0 = \frac{\pi}{2}, \varphi_0$ 任意$)$，$J_n = \boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}$ 在 $|jm\rangle$ 态下取 $J_n = m'$ 的概率

$$W(J_n = m') = W(J_x = m') = W(J_y = m') = \left|\left\langle jm\left|e^{-\frac{i\pi}{2}J_y}\right|jm'\right\rangle\right|^2$$

4.8 在 L^2、L_z 的共同本征态 $|lm\rangle$ 中，L_x^4 的平均值

题 4.8 (1) 在轨道角动量的 $l=1$ 子空间中，在 L^2、L_z 的共同本征态 $|lm\rangle$ 下(取 $\hbar = 1$)证明

$$\langle L_x^n\rangle = \langle L_y^n\rangle = \begin{cases} 0, & n \text{ 为奇数} \\ \frac{1}{2}(2-m^2), & n \text{ 为偶数} \end{cases}$$

(2) 在 $|lm\rangle$ 态下求 L_x^4 的平均值.

证明 (1) 在 $|lm\rangle$ 态下有

$$\langle L_x^2\rangle = \langle L_y^2\rangle = \frac{1}{2}(2-m^2)$$

且在 $l=1$ 子空间中有

$$L_x^3 = L_x, \qquad L_y^3 = L_y \tag{1}$$

由式(1)有

$$L_x^{2m+1} = L_x^{2m-1} = \cdots = L_x, \qquad L_x^{2m} = L_x^{2(m-1)} = \cdots = L_x^2$$

所以有

$$\langle L_x^{2m+1}\rangle = \langle L_x\rangle = 0, \qquad \langle L_x^{2m}\rangle = \langle L_x^2\rangle = \frac{1}{2}(2-m^2)$$

对 L_y 的证明同上.

(2) 由 $L_\pm = L_x \pm iL_y$，有

$$L_x = \frac{1}{2}(L_+ + L_-), \qquad L_y = \frac{1}{2i}(L_+ - L_-)$$

则

$$L_x^4 = \frac{1}{16}(L_+ + L_-)^4$$

上式在 $|lm\rangle$ 态下求平均时，右边不为零的项为

$$L_+^2L_-^2, \quad L_-^2L_+^2, \quad (L_+L_-)^2, \quad (L_-L_+)^2, \quad L_+L_-L_-L_+, \quad L_-L_+L_+L_-$$

由于

$$L_-L_+|lm\rangle = [l(l+1) - m(m+1)]|lm\rangle, \qquad L_+L_-|lm\rangle = [l(l+1) - m(m-1)]|lm\rangle$$

$$L_+^2|lm\rangle = [l(l+1) - m(m+1)]^{1/2}[l(l+1) - m(m+1)(m+2)]^{1/2}|l, m+2\rangle$$

$$L_-^2|lm\rangle = [l(l+1) - m(m-1)]^{1/2}[l(l+1) - m(m-1)(m-2)]^{1/2}|l, m-2\rangle$$

$$\left[L_+^2|lm\rangle\right]^\dagger = \langle lm|L_-^2, \quad \left[L_-^2|lm\rangle\right]^\dagger = \langle lm|L_+^2$$

所以在 $|lm\rangle$ 态下

$$\langle L_x^4\rangle = \frac{1}{16}\left\{6[l(l+1)]^2 - 4l(l+1)(3m^2+1) + 2m^2(3m^2+5)\right\}$$

对于 $l=2$ 时，有

$$\langle L_x^4\rangle_{2m} = \frac{1}{8}\left(96 - 31m^2 + 3m^4\right)$$

$l=2$，$m=0$ 时

$$\langle L_x^4\rangle_{20} = 12$$

$l=2$，$m=1$ 时

$$\langle L_x^4\rangle_{21} = \frac{17}{2}$$

4.9　在 Y_{20} 态下，L_x 的可能值及相应概率

题 4.9　在 L^2、L_z 的共同本征态 Y_{20} 中求 L_x 的各种可能值及相应的概率.

解法一　在 Y_{20} 态下，L_x 可能值为 $2\hbar$, $\hbar$, 0, $-\hbar$, $-2\hbar$. 设其可能相应的概率为 W_2, W_1, W_0, W_{-1}, W_{-2}，由上题结果有 $W_2 = W_{-2}$, $W_{-1} = W_1$，故有

$$2W_2 + 2W_1 + W_0 = 1, \qquad \text{归一化} \tag{1}$$

另由 $\langle L_x^2\rangle_{20} = \frac{1}{2}[2(2+1)]\hbar^2 = 3\hbar^2$ 有

$$8W_2 + 2W_1 = 3 \tag{2}$$

$\langle L_x^4\rangle_{20} = 12\hbar^4$，有

$$32W_2 + 2W_1 = 12 \tag{3}$$

联立式(1)、式(2)、式(3)解出

$$W_2 = W_{-2} = \frac{3}{8} \qquad W_1 = W_{-1} = 0 \qquad W_0 = \frac{1}{4}$$

解法二　设 L^2, L_x 的共同本征态为 $|2m'\rangle_x$ $(m' = 2,\ 1,\ 0,\ -1,\ -2)$，设 L_z 的本征态 $|2m\rangle$

$$|2m\rangle = \sum_{m'=-2}^{2} C_{m'} |2m'\rangle_x \tag{4}$$

在 L^2, L_x 表象中引入升降算符 $L'_\pm = (L_y \pm iL_z)$，且

$$L_z = \frac{1}{2i}(L'_+ - L'_-) \tag{5}$$

且

$$L'_\pm |2m'\rangle_x = \hbar[6 - m'(m' \pm 1)]^{1/2} |2, m' \pm 1\rangle_x$$

将式(5)作用于式(4)两边有

$$\begin{aligned} 2im|2m\rangle = {} & 2C_1|2,2\rangle_x + (\sqrt{6}C_0 - 2C_2)|2,1\rangle_x + (\sqrt{6}C_{-1} - \sqrt{6}C_1)|2,0\rangle_x \\ & + (2C_{-2} - \sqrt{6}C_0)|2,-1\rangle_x - 2C_{-1}|2,-2\rangle_x \end{aligned} \tag{6}$$

式(4)、式(6)两式比较

$$imC_2 = C_1, \qquad 2imC_1 = \sqrt{6}C_0 - 2C_0, \qquad 2imC_0 = \sqrt{6}(C_{-1} - C_1)$$

$$2imC_{-1} = -2C_{-2} - \sqrt{6}C_0, \qquad imC_{-2} = -C_{-1}$$

另由归一化条件

$$\sum_{m'=-2}^{2} |C_{m'}|^2 = 1$$

可确定诸系数. 对 $|2,0\rangle$ 态，计算结果为

$$|C_2|^2 = |C_{-2}|^2 = \frac{3}{8}, \qquad |C_1|^2 = |C_{-1}|^2 = 0, \qquad |C_0|^2 = \frac{1}{4}$$

对 $|2,1\rangle$ 态，计算结果为

$$|C_2|^2 = |C_{-2}|^2 = \frac{1}{4}, \qquad |C_1|^2 = |C_{-1}|^2 = \frac{1}{4}, \qquad |C_0|^2 = 0$$

解法三　在 L^2, L_z 表象的 $l = 2$ 的子空间中，给出 L_x 的矩阵表示，然后求出 $L_x = 2\hbar$，$\hbar$，0，$-\hbar$，$-2\hbar$ 的本征态

$$\phi_{22} = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ \sqrt{6} \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad \phi_{21} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad \phi_{20} = \sqrt{\frac{3}{8}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -\sqrt{\frac{2}{3}} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad \phi_{20} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$C_2=\phi_{22}^{\dagger}Y_{20}=\frac{1}{4}\left(1,2,\sqrt{6},2,1\right)\begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\\0\end{pmatrix}=\frac{\sqrt{6}}{4}$$

$$|C_2|^2=\frac{3}{8}=|C_{-2}|^2=\left|\phi_{2-2}^{\dagger}Y_{20}\right|^2$$

$$|C_1|^2=|C_{-1}|^2=\left|\phi_{21}^{\dagger}Y_{20}\right|^2=0\quad,\qquad \phi_{2-2}=\frac{1}{4}\begin{pmatrix}1\\-2\\\sqrt{6}\\-2\\1\end{pmatrix}$$

$$|C_0|^2=\left|\phi_{20}^{\dagger}Y_{20}\right|^2=\frac{1}{4}$$

所在$|20\rangle$态.

4.10　与角动量J对易的标量算符在$|j,m\rangle$中的平均值与量子数m无关

题 4.10　设算符F和角动量算符J对易，即F为标量算符，证明：(1) 在J^2、J_z的共同本征态$|jm\rangle$下，F的平均值与量子数m无关；(2) 给定j后，在$|jm\rangle$子空间中，F可表示为常数矩阵.

证明　(1) 令$J_{\pm}=J_x\pm iJ_y$，有(取$\hbar=1$)

$$[F,J_{\pm}]=0,\qquad [F,J_z]=0$$

$$J_+|jm\rangle=\left[j(j+1)-m(m+1)\right]^{1/2}|j,m+1\rangle=a_m|j,m+1\rangle$$

$$\langle jm|J_-=\left[j(j+1)-m(m+1)\right]^{1/2}\langle j,m+1|=a_m\langle j,m+1|$$

由于

$$\langle j,m+1|F|j,m+1\rangle=\frac{1}{a_m^2}\langle jm|J_-FJ_+|jm\rangle=\frac{1}{a_m^2}\langle jm|FJ_-J_+|jm\rangle$$

因为

$$J_-J_+|jm\rangle=a_m^2|jm\rangle$$

所以

$$\langle j,m+1|F|j,m+1\rangle=\langle jm|F|jm\rangle$$

依此类推，对属于同一j的m和m'总有

$$\langle jm'|F|jm'\rangle=\langle jm|F|jm\rangle$$

即$\langle F\rangle$与m无关.

(2) 利用F与J_z的对易性，可有

$$m\langle jm'|F|jm\rangle=\langle jm'|FJ_z|jm\rangle=\langle jm'|J_zF|jm\rangle=m'\langle jm'|F|jm\rangle$$

即有

$$\langle jm'|F|jm\rangle(m-m')=0$$

即$m'\neq m$时，$\langle jm'|F|jm\rangle=0$，即

$$\langle jm'|F|jm\rangle = f(j)\delta_{m'm}$$

其中

$$f(j)=\langle jj|F|jj\rangle=\langle j,j-1|F|j,j-1\rangle=\cdots=\langle jm|F|jm\rangle=\cdots$$

因此，当 j 给定后，在 $|jm\rangle$ 子空间中，F 的非对角元皆为零，对角元皆为 $f(j)$，所以 F 的矩阵表示为

$$F=f(j)I$$

其中 I 为单位矩阵.

4.11 角动量的投影定理

题 4.11 设 $\boldsymbol{J}$ 为角动量，$\boldsymbol{A}$ 为矢量算符，满足关系(取 $\hbar=1$)

$$\left[J_\alpha, A_\beta\right]=\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\gamma$$

在 J^2，J_z 表象中，证明：(1) 在 $|jm\rangle$ 态下，$\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}$ 的平均值与量子数 m 无关；(2) $\langle jm'|\boldsymbol{A}|jm\rangle=\langle jm'|\boldsymbol{J}|jm\rangle\dfrac{\langle \boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}\rangle_j}{j(j+1)}$.

证明 (1) 因为 $[\boldsymbol{J},\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}]=0$，由上题结果 $\langle jm|\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}|jm\rangle$ 与 m 无关，仅为 j 的函数，可记为

$$\langle jm|\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}|jm\rangle=\langle \boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}\rangle_j$$

且

$$\langle jm'|\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}|jm\rangle=\langle \boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}\rangle_j\delta_{mm'}$$

即在属于同一个 j 的 $\{|jm\rangle\}$ 子空间中，$\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}$ 等价于常数矩阵 $\langle \boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}\rangle_j$.

(2) 利用公式

$$J^4\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}J^4-2J^2\boldsymbol{A}J^2=2\left(J^2\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}J^2\right)-4\boldsymbol{J}(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A})$$

取矩阵元 $\langle jm'|\cdots|jm\rangle$，则 $J^2\to j(j+1)$，$\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}\to\langle \boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}\rangle_j$，上式左端对矩阵元的贡献为零，因此有

$$\langle jm'|\boldsymbol{A}|jm\rangle=\langle jm'|\boldsymbol{J}|jm\rangle\frac{\langle \boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}\rangle_j}{j(j+1)} \tag{1}$$

如取 $m'=m$，即有

$$\langle \boldsymbol{A}\rangle_{jm}=\frac{\langle \boldsymbol{J}\rangle_{jm}\langle \boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}\rangle_j}{j(j+1)} \tag{2}$$

式(1)和式(2)称为投影定理. 式(2)不仅对 $|jm\rangle$ 态成立，而且对于 $\boldsymbol{J}$ 在任何 $\boldsymbol{n}$ 方向的投影 J_n 的任何一个本征态 $|j,J_n=m\rangle$ 也是成立的.

4.12 角动量算符和矢量算符的几个代数关系

题 4.12 设 $\boldsymbol{J}$ 为角动量算符，$\boldsymbol{A}$ 为矢量算符，满足关系

$$\left[J_\alpha, A_\beta\right]=\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\gamma,\qquad 取\ \hbar=1$$

(1) 计算 $\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J}+\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A}$；(2) 计算 $[\boldsymbol{J},\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}],\left[J^2,\boldsymbol{A}\right]$；(3) 证明 $\boldsymbol{J}\times(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})=(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{J}-J^2\boldsymbol{A}+\mathrm{i}\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A}$；$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J})\times\boldsymbol{J}=\boldsymbol{J}(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J})-\boldsymbol{A}J^2+\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J}$ (4) 证明 $\left[J^2,\left[J^2,\boldsymbol{A}\right]\right]=2\left(J^2\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}J^2\right)-4\boldsymbol{J}(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A})$

解 (1) 因为

$$\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J}=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\alpha J_\beta\boldsymbol{e}_\gamma=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}J_\beta A_\alpha\boldsymbol{e}_\gamma+\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\alpha\beta\theta}A_\theta\boldsymbol{e}_\gamma$$

$$=-\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A}+2\mathrm{i}\delta_{\gamma\theta}A_\theta\boldsymbol{e}_\gamma=-\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A}+2\mathrm{i}\boldsymbol{A}$$

所以有

$$\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J}+\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A}=2\mathrm{i}\boldsymbol{A}\tag{1}$$

(2)

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{J},\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}]&=\boldsymbol{e}_\alpha\left[J_\alpha,J_\beta\cdot A_\beta\right]=\boldsymbol{e}_\alpha\left[J_\alpha,J_\beta\right]A_\beta+\boldsymbol{e}_\alpha J_\beta\left[J_\alpha A_\beta\right]\\&=\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\boldsymbol{e}_\alpha J_\gamma A_\beta+\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\boldsymbol{e}_\alpha J_\beta A_\gamma=\mathrm{i}(-\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A}+\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})=0\end{aligned}\tag{2}$$

$$\begin{aligned}\left[J^2,\boldsymbol{A}\right]&=\left[J_\alpha J_\alpha,A_\beta\right]\boldsymbol{e}_\beta=J_\alpha\left[J_\alpha,A_\beta\right]\boldsymbol{e}_\beta+\left[J_\alpha,A_\beta\right]J_\alpha\boldsymbol{e}_\beta\\&=\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}J_\alpha A_\gamma\boldsymbol{e}_\beta+\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\gamma J_\alpha\boldsymbol{e}_\beta\\&=\mathrm{i}(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J}-\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})\end{aligned}\tag{3}$$

(3) 利用公式

$$\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})=A_\alpha\boldsymbol{B}C_\alpha-(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})\boldsymbol{C}$$
$$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\times\boldsymbol{C}=A_\alpha\boldsymbol{B}C_\alpha-\boldsymbol{A}(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{C})$$

可得

$$\boldsymbol{J}\times(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})=J_\alpha J_\beta A_\alpha\boldsymbol{e}_\beta-J^2\boldsymbol{A}$$

因为

$$J_\beta A_\alpha=A_\alpha J_\beta-\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\gamma$$

所以

$$\boldsymbol{J}\times(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})=J_\alpha A_\alpha J_\beta\boldsymbol{e}_\beta-\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}J_\alpha A_\gamma\boldsymbol{e}_\beta-J^2\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{J}-J^2\boldsymbol{A}+\mathrm{i}\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A}\tag{4}$$

类似可证

$$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J})\times\boldsymbol{J}=\boldsymbol{J}(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J})-\boldsymbol{A}J^2+\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J}\tag{5}$$

(4) 利用式(3)，有

$$\begin{aligned}\left[J^2,\left[J^2,\boldsymbol{A}\right]\right]&=\mathrm{i}\left[J^2,(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J}-\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})\right]=\mathrm{i}\left[J^2,\boldsymbol{A}\right]\times\boldsymbol{J}-\mathrm{i}\boldsymbol{J}\times\left[J^2,\boldsymbol{A}\right]\\&=(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J})\times\boldsymbol{J}+\boldsymbol{J}\times(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J}-\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})\end{aligned}$$

再利用式(1)、式(4)、式(5)，可得

$$\left[J^2,\left[J^2,\boldsymbol{A}\right]\right]=2\left(J^2\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}J^2\right)-4\boldsymbol{J}(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A})$$

4.13 σ_n 的本征值与本征态

题 4.13 给定(θ,φ)方向单位矢量

$$\boldsymbol{n}=(n_x,n_y,n_z)=(\sin\theta\cos\varphi,\sin\theta\sin\varphi,\cos\theta)$$

求$\sigma_n=\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$的本征值和本征函数(取$\sigma_z$表象).

解 在σ_z表象中，Pauli 算符$\boldsymbol{\sigma}$的矩阵表示为

$$\sigma_x=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\qquad \sigma_y=\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}\\ \mathrm{i}&0\end{pmatrix},\qquad \sigma_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$$

因此

$$\sigma_n=\sigma\cdot n=n_x\sigma_x+n_x\sigma_y+n_z\sigma_z=\begin{pmatrix}n_z, & n_x-\mathrm{i}n_y\\ n_x+\mathrm{i}n_y, & -n_z\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\theta, & \sin\theta \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\\ \sin\theta \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}, & -\cos\theta\end{pmatrix}$$

因σ_n的本征值为±1(这是基本实验事实). 设σ_n的本征函数为$\phi=\begin{pmatrix}C_1\\C_2\end{pmatrix}$，则相应的本征方程为

$$\sigma_n\begin{pmatrix}C_1\\C_2\end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix}C_1\\C_2\end{pmatrix}$$

对于$\lambda=1$解出

$$\phi_1(\theta,\varphi)=\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}}\\ \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}}\end{pmatrix}$$

对于$\sigma_n=\lambda=-1$，可有

$$\phi_{-1}(\theta,\varphi)=\begin{pmatrix}\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}}\\ -\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}}\end{pmatrix}$$

4.14 自旋$\frac{1}{2}$粒子，σ_n的可能值及相应概率

题 4.14 (1) 对于电子自旋态$\chi_{1/2}(\sigma_z=1)$，求σ_n的可能值及相应的概率；(2) 对于$\sigma_n=1$的自旋态，求$\boldsymbol{\sigma}$各分量的可能值及相应概率，以及$\boldsymbol{\sigma}$的平均值.

解 (1) $\chi_{1/2}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$中，$\sigma_n=1$的概率为

$$\left|\langle\phi_1|\chi_{1/2}\rangle\right|^2=\cos^2\frac{\theta}{2}=\frac{1}{2}(1+n_z)$$

$\sigma_n=-1$的概率为

$$\left|\left\langle\phi_{-1}\middle|\chi_{1/2}\right\rangle\right|^2=\sin^2\frac{\theta}{2}=\frac{1}{2}(1-n_z)$$

(2) 在自旋态 $\phi_1(\sigma_n=1)$ 中 $\sigma_z=1$，$\sigma_z=-1$ 的概率分别为

$$\left|\left\langle\chi_{1/2}\middle|\phi_1\right\rangle\right|^2=\frac{1}{2}(1+n_z),\qquad \left|\left\langle\chi_{-1/2}\middle|\phi_1\right\rangle\right|^2=\frac{1}{2}(1-n_z)$$

所以

$$\langle\sigma_z\rangle=\frac{1}{2}(1+n_z)-\frac{1}{2}(1-n_z)=n_z$$

同样地，有 $\sigma_x=\pm1$ 的概率为 $\frac{1}{2}(1\pm n_x)$，$\langle\sigma_x\rangle=n_x$；$\sigma_y=\pm1$ 的概率为 $\frac{1}{2}(1\pm n_y)$，$\langle\sigma_y\rangle=n_y$

类似地，容易算出，在自旋态 $\phi_{-1}(\sigma_n=-1)$ 中，$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle=-\boldsymbol{n}$.

4.15　与 $\boldsymbol{\sigma}$ 的三个分量都对易的非零二维矩阵必为常数矩阵

题 4.15　证明与 $\boldsymbol{\sigma}$ 的三个分量都对易的非零二维矩阵必为常数矩阵.

证明　设二维矩阵 A 满足

$$A\boldsymbol{\sigma}=\boldsymbol{\sigma}A$$

由于对于任意二维矩阵，$I=\sigma_0$，$\sigma_x=\sigma_1$，$\sigma_y=\sigma_2$，$\sigma_z=\sigma_3$ 为完备基，故

$$A=\sum_{i=0}^{3}C_i\sigma_i \tag{1}$$

以 σ_1 分别左乘和右乘式(1)，得到

$$\sigma_1A=C_0\sigma_1+C_1+\mathrm{i}C_2\sigma_3-\mathrm{i}C_3\sigma_2$$
$$A\sigma_1=C_0\sigma_1+C_1-\mathrm{i}C_2\sigma_3+\mathrm{i}C_3\sigma_2$$

由题设 $\sigma_1A=A\sigma_1$，且由于 σ_2、σ_3 独立有

$$C_2=0,\qquad C_3=0$$

类似地，以 σ_2 分别左乘和右乘式(1)，可证

$$C_1=0,\qquad C_3=0$$

因此 $A=C_0I$，即 A 为常量矩阵.

4.16　不存在与 $\boldsymbol{\sigma}$ 的三个分量都反对易的非零二维矩阵

题 4.16　证明不存在与 $\boldsymbol{\sigma}$ 的三个分量都反对易的非零二维矩阵.

证明　设二维矩阵 A 和 $\boldsymbol{\sigma}$ 反对易，即满足

$$A\sigma_1=-\sigma_1A \tag{1}$$
$$A\sigma_2=-\sigma_2A \tag{2}$$
$$A\sigma_3=-\sigma_3A \tag{3}$$

以 σ_2 右乘式(1)，得到

$$\mathrm{i}A\sigma_3=-\sigma_1A\sigma_2$$

利用式(2)，式(3)，有

$$-i\sigma_3 A = \sigma_1\sigma_2 A = i\sigma_3 A$$

从 $i\sigma_3$ 左乘上式，即得

$$A = -A, \qquad 即\ A = 0$$

4.17　SU_2 矩阵的一般形式

题 4.17　满足 $U^\dagger U = UU^\dagger = 1$，$\det U = 1$ 的 n 维矩阵称为 SU_n 矩阵，求 SU_2 的一般形式.

解　设 $U = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$

$$U^\dagger U = 1 \Rightarrow \begin{cases} |a|^2 + |c|^2 = 1 \\ a^* b + c^* d = 0 \\ b^* a + d^* c = 0 \\ |b|^2 + |d|^2 = 1 \end{cases}, \qquad U^\dagger U = 1 \Rightarrow \begin{cases} a^* c + b^* d = 0 \\ c^* a + d^* b = 0 \\ |c|^2 + |d|^2 = 1 \end{cases}$$

$$\det U = 1 \Rightarrow ad - bc = 1$$

联立这些条件，解得

$$a = \cos\omega e^{i\alpha}, \qquad b = \sin\omega e^{i\beta}, \qquad c = -\sin\omega e^{-i\beta}, \quad d = \cos\omega e^{-i\alpha}$$

其中 α、β、ω 是实参量.

4.18　同位旋算符 τ

题 4.18　为统一描述中子和质子，引入同位旋算符 τ，设其三个分量 τ_1，τ_2，τ_3 的本征值都是 ± 1，即 $\tau_1^2 = \tau_2^2 = \tau_3^2 = 1$，且有 $[\tau_1, \tau_2]_+ = [\tau_2, \tau_3]_+ = [\tau_3, \tau_1]_+ = 0$，记 $\tau_3 = \begin{cases} +1, & 中子态 \\ -1, & 质子态 \end{cases}$；在 τ_3 表象中求 τ_1，τ_2 的矩阵.

解　在 τ_3 表象中

$$\tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

设 $\tau_1 = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$，由 $\tau_3\tau_1 + \tau_1\tau_3 = 0$ 及 $\tau_1^\dagger = \tau_1$，$\tau_1^2 = 1$ 有

$$\tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\alpha} \\ e^{-i\alpha} & 0 \end{pmatrix}$$

由 $\tau_2\tau_3 + \tau_3\tau_2 = 0$，$\tau_2^\dagger = \tau_2$，$\tau_2^2 = 1$ 有

$$\tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\beta} \\ e^{-i\beta} & 0 \end{pmatrix}$$

再由 $\tau_1\tau_2+\tau_2\tau_1=0$，有 $\cos(\alpha-\beta)=0$，$\alpha-\beta=\frac{\pi}{2}+k\pi$，$k=0,1,2,\cdots$.

取 $\alpha=0,\ \ \beta=-\frac{\pi}{2}$ 有

$$\tau_1=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\qquad \tau_2=\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{pmatrix}$$

4.19　$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})=\boldsymbol{AB}+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})$

题 4.19　设 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$ 是与 $\boldsymbol{\sigma}$ 对易的任何矢量算符，证明 $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})$.

证明

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})=\sigma_\alpha\sigma_\beta A_\alpha B_\beta$$

利用公式

$$\sigma_\alpha\sigma_\beta=\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_\gamma+\delta_{\alpha\beta}$$

即得

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})=\delta_{\alpha\beta}A_\alpha B_\beta+\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_\gamma A_\alpha B_\beta=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})$$

4.20　$\mathrm{Tr}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})$, $\mathrm{Tr}\left[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})\right]$

题 4.20　计算 $\mathrm{Tr}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})$，$\mathrm{Tr}\left[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})\right]$ 以及 $\mathrm{Tr}\left[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{C})\right]$，其中 $\boldsymbol{\sigma}$ 为 Pauli 矩阵，$\boldsymbol{A}$，$\boldsymbol{B}$，$\boldsymbol{C}$ 为与 $\boldsymbol{\sigma}$ 对易的算符或常矢量.

解

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}=\sigma_xA_x+\sigma_yA_y+\sigma_zA_z$$

由于

$$\mathrm{Tr}\sigma_i=0,\qquad i=1,2,3$$

显然有

$$\mathrm{Tr}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})=0\tag{1}$$

利用

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\tag{2}$$

并利用式(1)得

$$\mathrm{Tr}\left[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})\right]=2\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}\tag{3}$$

由式(2)有

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{C})=(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{C})+\mathrm{i}\left[\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\right](\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{C})$$

上式求迹，第一项为 $\boldsymbol{\sigma}$ 线性项，迹为零，因此

$$\mathrm{Tr}\left[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{C})\right]=\mathrm{i}\mathrm{Tr}\left[\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\right](\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{C})$$

再利用式(3)，有

$$\mathrm{Tr}\left[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{C})\right]=2\mathrm{i}(A\times\boldsymbol{B})\cdot\boldsymbol{C}=2\mathrm{i}A\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})$$

4.21 $\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})-\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}-(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{\sigma}$

题 4.21 设$\boldsymbol{A}$与$\boldsymbol{\sigma}$对易，证明$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})-\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}-(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{\sigma}=\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma}$.

证明

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})=\sigma_\alpha\sigma_\beta A_\beta \boldsymbol{e}_\alpha$$

利用

$$\sigma_\alpha\sigma_\beta=\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_\gamma+\varepsilon_{\alpha\beta}$$

即得

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})=A_\beta\boldsymbol{e}_\alpha\delta_{\alpha\beta}+\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_\gamma A_\beta\boldsymbol{e}_\alpha=\boldsymbol{A}+\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma}$$

同理

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{\sigma}=\boldsymbol{A}-\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma}$$

所以

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})-\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}-(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{\sigma}=\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma}$$

进一步有

$$[\boldsymbol{\sigma},(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})]=2\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma}$$

4.22 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}=\cos\lambda+\mathrm{i}\sigma_z\sin\lambda$

题 4.22 设λ为常数，证明$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}=\cos\lambda+\mathrm{i}\sigma_z\sin\lambda$.

证明一

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(\mathrm{i}\lambda\sigma_z)^n$$

由于$\sigma_z^2=1$，所以

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_x}&=\sum_{n偶}\frac{(\mathrm{i}\lambda)^n}{n!}+\sigma_z\sum_{n奇}\frac{(\mathrm{i}\lambda)^n}{n!}\\&=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(\mathrm{i}\lambda)^{2k}}{(2k)!}+\sigma_z\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(\mathrm{i}\lambda)^{2k+1}}{(2k+1)!}\\&=\sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\frac{\lambda^{2k}}{(2k)!}+\mathrm{i}\sigma_z\sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\frac{\lambda^{2k+1}}{(2k+1)!}\\&=\cos\lambda+\mathrm{i}\sigma_z\sin\lambda\end{aligned}$$

证明二 由于

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}=C_0+C_1\sigma_z$$

将上式作用于σ_z本征值为±1的本征态$\chi_{\pm1/2}$上，有

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda}=C_0+C_1,\qquad \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda}=C_0-C_1$$

解出

$$C_0 = \cos\lambda, \qquad C_1 = \mathrm{i}\sin\lambda$$

证明三　在 σ_z 表象中，$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}$ 为对角阵，对角元为其本征值 $\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\lambda}$ ·

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z} = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\lambda + \mathrm{i}\sin\lambda & 0 \\ 0 & \cos\lambda - \mathrm{i}\sin\lambda \end{pmatrix}$$

故

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z} = \cos\lambda + \mathrm{i}\sigma_z\sin\lambda$$

讨论　以上证明过程中，主要利用了 $\sigma_z^2 = 1$，如果将 σ_z 该为 σ_n，由于 $\sigma_n^2 = 1$，同样可以证明

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_n} = \cos\lambda + \mathrm{i}\sigma_n\sin\lambda$$

4.23　$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}}$ 和 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}}$

题 4.23　设 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$ 为实常数矢量，试将 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}}$ 和 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}}$ 表示成 I 及 σ_x、σ_y、σ_z 的线性叠加，并计算它们的迹.

解　令 $\boldsymbol{A} = A\boldsymbol{n}$，其中 $\boldsymbol{n} = \dfrac{\boldsymbol{A}}{A}$，则

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\sigma_n\cdot A_n}$$

利用上题结果，即得

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}} = \cos A + \mathrm{i}\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}}{A}\sin A$$

上式中第二项为 $\boldsymbol{\sigma}$ 线性项，其迹为零，因此

$$\mathrm{Tre}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}} = 2\cos A$$

$$\begin{aligned}
\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}} &= \left(\cos A + \frac{\mathrm{i}}{A}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}\sin A\right)\left(\cos B + \frac{\mathrm{i}}{B}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}\sin B\right) \\
&= \cos A\cos B - (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})\frac{1}{AB}\sin A\sin B \\
&\quad + \mathrm{i}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\frac{1}{A}\sin A\cos B + \mathrm{i}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})\frac{1}{B}\cos A\sin B \\
&= \cos A\cos B - \frac{\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}}{AB}\sin A\sin B - \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\frac{1}{AB}\sin A\sin B \\
&\quad + \mathrm{i}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\frac{1}{A}\sin A\cos B + \mathrm{i}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})\frac{1}{B}\cos A\sin B
\end{aligned}$$

上式中后三项为 $\boldsymbol{\sigma}$ 的线性项，迹为 0，所以

$$\mathrm{Tr}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}}) = 2\cos A\cos B - 2\frac{\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}}{AB}\sin A\sin B$$

4.24 计算 $e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_\alpha e^{-i\lambda\sigma_z}$

题 4.24 化简 $e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_\alpha e^{-i\lambda\sigma_z}$，$\alpha = x, y$，其中 λ 为常数.

解法一 利用 Baker-Hausdorff 公式

$$e^{\lambda A}Be^{-\lambda A} = B + \lambda[A,B] + \frac{\lambda^2}{2!}[A,[A,B]] + \cdots$$

以及

$$[\sigma_\alpha, \sigma_\beta] = 2i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_\gamma$$

有

$$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_x e^{-i\lambda\sigma_z} = \sigma_x\cos 2\lambda - \sigma_y\sin 2\lambda$$

$$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_y e^{-i\lambda\sigma_z} = \sigma_x\sin 2\lambda + \sigma_y\cos 2\lambda$$

解法二 令

$$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_x e^{-i\lambda\sigma_z} = C_0 + C_1\sigma_x + C_2\sigma_y + C_3\sigma_z \tag{1}$$

将上式作用于 σ_z 的本征态 $\chi_{1/2}$，利用

$$\sigma_z\chi_{1/2} = \chi_{1/2}, \quad \sigma_x\chi_{1/2} = \chi_{-1/2}, \quad \sigma_y\chi_{1/2} = i\chi_{-1/2}$$

即得

$$e^{-2i\lambda}\chi_{-1/2} = (C_0 + C_3)\chi_{1/2} + (C_1 + iC_2)\chi_{-1/2}$$

比较上式两端系数，有

$$C_0 + C_3 = 0, \quad C_1 + iC_2 = e^{-2i\lambda} \tag{2}$$

再将式(1)作用于 σ_z 的本征态 $\chi_{-1/2}$，利用

$$\sigma_z\chi_{-1/2} = -\chi_{-1/2}, \quad \sigma_x\chi_{-1/2} = \chi_{1/2}, \quad \sigma_y\chi_{-1/2} = -i\chi_{1/2}$$

即得

$$e^{2i\lambda}\chi_{1/2} = (C_1 - iC_2)\chi_{1/2} + (C_0 - C_3)\chi_{-1/2}$$

比较系数有

$$C_0 - C_3 = 0, \quad C_1 - iC_2 = e^{2i\lambda} \tag{3}$$

由式(2)、式(3)解出

$$C_0 = C_3 = 0, \quad C_1 = \cos 2\lambda, \quad C_2 = -\sin 2\lambda$$

故

$$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_x e^{-i\lambda\sigma_z} = \sigma_x\cos 2\lambda - \sigma_y\sin 2\lambda$$

类似地

$$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_y e^{-i\lambda\sigma_z} = \sigma_x\sin 2\lambda + \sigma_y\cos 2\lambda$$

解法三 利用

$$e^{i\lambda\sigma_z} = \cos\lambda + i\sigma_z\sin\lambda$$

可得

$$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_x e^{-i\lambda\sigma_z}=(\cos\lambda+i\sigma_z\sin\lambda)\sigma_x(\cos\lambda-i\sigma_z\sin\lambda)$$

利用

$$\sigma_z^2=1,\qquad \sigma_z\sigma_x=-\sigma_x\sigma_z=i\sigma_y$$

可有

$$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_x e^{-i\lambda\sigma_z}=\sigma_x\cos 2\lambda-\sigma_y\sin 2\lambda$$

类似地，有

$$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_y e^{-i\lambda\sigma_z}=\sigma_x\sin 2\lambda+\sigma_y\cos 2\lambda$$

解法四　视 λ 为参数，令

$$f(\lambda)=e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_x e^{-i\lambda\sigma_z} \tag{4}$$

$$g(\lambda)=e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_y e^{-i\lambda\sigma_z} \tag{5}$$

且

$$f(0)=\sigma_x,\qquad g(0)=\sigma_y$$

式(4)、式(5)对 λ 求导有

$$\left.\begin{aligned}f'(\lambda)&=-2g(\lambda)\\ g'(\lambda)&=2f(\lambda)\end{aligned}\right\}$$

有

$$\left.\begin{aligned}\frac{d}{d\lambda}[f(\lambda)+ig(\lambda)]&=2i[f(\lambda)+ig(\lambda)]\\ \frac{d}{d\lambda}[f(\lambda)-ig(\lambda)]&=-2i[f(\lambda)-ig(\lambda)]\end{aligned}\right. \tag{6}$$

式(6)之解为

$$f(\lambda)+ig(\lambda)=(\sigma_x+i\sigma_y)e^{2i\lambda}$$

$$f(\lambda)-ig(\lambda)=(\sigma_x-i\sigma_y)e^{-2i\lambda}$$

解出

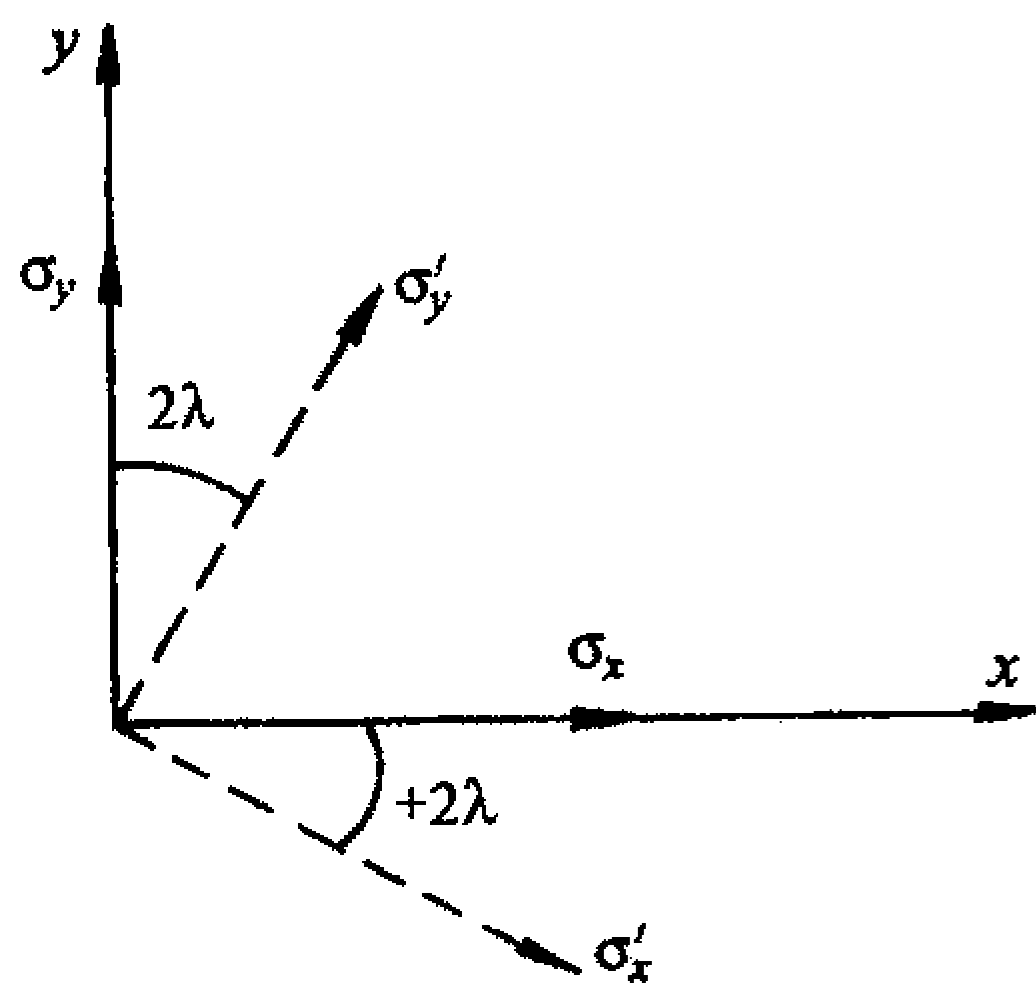
$$f(\lambda)=\sigma_x\cos 2\lambda-\sigma_y\sin 2\lambda$$

$$g(\lambda)=\sigma_x\sin 2\lambda+\sigma_y\cos 2\lambda$$

解法五　因为 $e^{i\lambda\sigma_z}=e^{\frac{i}{\hbar}(2\lambda)S_z}$ 是自旋空间中，绕子轴转动角度为 -2λ 的转动算符，如题图 4.24 所示

$$\sigma_x'=e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_x e^{-i\lambda\sigma_z}=\sigma_x\cos 2\lambda-\sigma_y\sin 2\lambda$$

$$\sigma_y'=e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_y e^{-i\lambda\sigma_z}=\sigma_x\sin 2\lambda+\sigma_y\cos 2\lambda$$



题图 4.24

类似的公式有

$$\begin{cases}e^{i\lambda\sigma_y}\sigma_x e^{-i\lambda\sigma_y}=\sigma_x\cos 2\lambda+\sigma_z\sin 2\lambda\\ e^{i\lambda\sigma_y}\sigma_z e^{-i\lambda\sigma_y}=\sigma_z\cos 2\lambda-\sigma_x\sin 2\lambda\end{cases}$$

$$\begin{cases} e^{i\lambda\sigma_x}\sigma_y e^{-i\lambda\sigma_x} = \sigma_y \cos 2\lambda - \sigma_z \sin 2\lambda \\ e^{i\lambda\sigma_x}\sigma_z e^{-i\lambda\sigma_x} = \sigma_y \sin 2\lambda + \sigma_z \cos 2\lambda \end{cases}$$

4.25　$e^{i\lambda\sigma_n}\boldsymbol{\sigma}e^{-i\lambda\sigma_n} = \boldsymbol{n}\sigma_n + (\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}\cos 2\lambda + \boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\lambda$

题 4.25　设λ为实数，$\boldsymbol{n}$为(θ,φ)方向单位矢量，证明

$$e^{i\lambda\sigma_n}\boldsymbol{\sigma}e^{-i\lambda\sigma_n} = \boldsymbol{n}\sigma_n + (\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}\cos 2\lambda + \boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\lambda$$

证明一　视λ为参变量，(但$\boldsymbol{n}$固定不动)，令

$$U(\lambda) = e^{-i\lambda\sigma_n}, \qquad U^\dagger = e^{i\lambda\sigma_n}$$

$$\boldsymbol{f}(\lambda) = U^\dagger(\lambda)\boldsymbol{\sigma}U(\lambda) \tag{1}$$

注意到

$$U(0) = U^\dagger(0) = 1, \qquad \boldsymbol{f}(0) = \boldsymbol{\sigma}$$

对λ求导，有

$$\frac{dU}{d\lambda} = -iU\sigma_n, \qquad \frac{dU^\dagger}{d\lambda} = iU^\dagger\sigma_n$$

$$\frac{d\boldsymbol{f}}{d\lambda} = iU^\dagger[\sigma_n, \boldsymbol{\sigma}]U$$

由于

$$[\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}, \boldsymbol{\sigma}] = -2i\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}$$

即得

$$\frac{d\boldsymbol{f}}{d\lambda} = 2\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f} \tag{2}$$

由式(1)，有

$$\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{f}(\lambda) = U^\dagger\sigma_n U = \sigma_n$$

以$\boldsymbol{n}\times$式(2)，则得

$$\boldsymbol{n}\times\frac{d\boldsymbol{f}}{d\lambda} = 2\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}) = 2\boldsymbol{n}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{f}) - 2\boldsymbol{f} = 2\boldsymbol{n}\sigma_n - 2\boldsymbol{f} \tag{3}$$

式(2)+i×式(3)，得到

$$\frac{d}{d\lambda}(\boldsymbol{f} + i\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}) = -2i(\boldsymbol{f} + i\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f} - \boldsymbol{n}\sigma_n)$$

亦即

$$\frac{d}{d\lambda}(\boldsymbol{f} + i\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f} - \boldsymbol{n}\sigma_n) = -2i(\boldsymbol{f} + i\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f} - \boldsymbol{n}\sigma_n)$$

上式的解为

$$\boldsymbol{f}(\lambda) + i\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(\lambda) - \boldsymbol{n}\sigma_n = [\boldsymbol{f}(0) + i\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(0) - \boldsymbol{n}\sigma_n]e^{-2i\lambda} = (\boldsymbol{\sigma} + i\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{n}\sigma_n)e^{-2i\lambda}$$

由于σ_n，$\boldsymbol{f}(\lambda)$，$\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(\lambda)$皆为 Hermite 算符，上式取共轭，有

$$\boldsymbol{f}(\lambda) - i\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(\lambda) - \boldsymbol{n}\sigma_n = (\boldsymbol{\sigma} - i\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{n}\sigma_n)e^{2i\lambda}$$

两式相加，有

$$f(\lambda)=\sigma\cos 2\lambda+\boldsymbol{n}\times\sigma\sin 2\lambda+\boldsymbol{n}\sigma_n(1-\cos 2\lambda) \tag{4}$$

由于

$$(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}=\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{n}\sigma_n$$

式(4)化为

$$f(\lambda)=\boldsymbol{n}\sigma_n+(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}\cos 2\lambda+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\lambda$$

证明二　利用

$$U^{\dagger}(\lambda)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda d_n}=\cos\lambda+\mathrm{i}\sigma_n\sin\lambda,\qquad [\sigma_n,\boldsymbol{\sigma}]=-2\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}$$

可得

$$\left[U^{\dagger}(\lambda),\boldsymbol{\sigma}\right]=\mathrm{i}\sin\lambda[\sigma_n,\boldsymbol{\sigma}]=2\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin\lambda$$

因此

$$U^{\dagger}(\lambda)\boldsymbol{\sigma}U(\lambda)=\left(\boldsymbol{\sigma}U^{\dagger}+2\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin\lambda\right)U=\boldsymbol{\sigma}+2(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})U(\lambda)\sin\lambda \tag{5}$$

以

$$U(\lambda)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_n}=\cos\lambda-\mathrm{i}\sigma_n\sin\lambda$$

代入式(5)，得到

$$U^{\dagger}\boldsymbol{\sigma}U=\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin\lambda-2\mathrm{i}(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\sigma_n\sin^2\lambda$$

取共轭，得到

$$U^{\dagger}\boldsymbol{\sigma}U=\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin\lambda+2\mathrm{i}(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\sigma_n\sin^2\lambda$$

两式相加，有

$$\begin{aligned}U^{\dagger}\boldsymbol{\sigma}U&=\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\lambda+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times[\sigma_n,\boldsymbol{\sigma}]\sin^2\lambda\\&=\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\lambda+2\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\sin^2\lambda\\&=\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\lambda+(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}(\cos 2\lambda-1)\end{aligned}$$

再利用

$$(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}=\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{n}\sigma_n$$

有

$$U^{\dagger}\boldsymbol{\sigma}U=\boldsymbol{n}\sigma_n+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\lambda+(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}\cos 2\lambda$$

4.26　$\sigma_{\pm}\equiv\sigma_x\pm\mathrm{i}\sigma_y$ 的一些代数结果

题 4.26　定义 $\sigma_{\pm}\equiv\sigma_x\pm\mathrm{i}\sigma_y$，(1)计算$[\sigma_+,\sigma_-]$，$[\sigma_z,\sigma_{\pm}]$，证明$(\sigma_+)^2=(\sigma_-)^2=0$；(2) 证明$\mathrm{e}^{\xi\sigma_z}\sigma_{\pm}=\sigma_{\pm}\mathrm{e}^{\xi\sigma_z}\mathrm{e}^{\pm2\xi}$　(ξ 为常数)；(3) 化简$\mathrm{e}^{\xi\sigma_z}\sigma_x\mathrm{e}^{-\xi\sigma_z}$和$\mathrm{e}^{\xi\sigma_z}\sigma_y\mathrm{e}^{-\xi\sigma_z}$.

解　(1) 利用$\sigma_i^2=1$，$\sigma_x\sigma_y=-\sigma_y\sigma_x=\mathrm{i}\sigma_z$ 等

$$(\sigma_+)^2=(\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y)^2=\sigma_x^2-\sigma_y^2+\mathrm{i}(\sigma_x\sigma_y+\sigma_y\sigma_z)=0$$

同样有

$$(\sigma_-)^2=0$$

另外

$$\sigma_+\sigma_- = (\sigma_x + \mathrm{i}\sigma_y)(\sigma_x - \mathrm{i}\sigma_y) = \sigma_x^2 + \sigma_y^2 - \mathrm{i}\left[\sigma_x, \sigma_y\right] = 2(1+\sigma_z)$$

$$\sigma_-\sigma_+ = (\sigma_x - \mathrm{i}\sigma_y)(\sigma_x + \mathrm{i}\sigma_y) = 2(1-\sigma_z)$$

所以

$$\left[\sigma_+, \sigma_-\right] = 4\sigma_z$$

另外

$$\left[\sigma_z, \sigma_+\right] = \left[\sigma_z, \sigma_x\right] + \mathrm{i}\left[\sigma_z, \sigma_y\right] = 2\mathrm{i}\sigma_y + 2\sigma_x = 2\sigma_+ \tag{1}$$

取共轭，得

$$\left[\sigma_z, \sigma_-\right] = -2\sigma_- \tag{2}$$

(2) 将式(1)、式(2)写为

$$\sigma_z\sigma_\pm = \sigma_\pm(\sigma_z \pm 2)$$

反复利用此式，有

$$\sigma_z^n\sigma_\pm = \sigma_\pm(\sigma_z \pm 2)^n$$

故对σ_z的整幂函数$f(\sigma_z)$，有

$$f(\sigma_z)\sigma_\pm = \sigma_\pm f(\sigma_z \pm 2)$$

所以

$$\mathrm{e}^{\xi\sigma_z}\sigma_\pm = \sigma_\pm \mathrm{e}^{\xi\sigma_z}\mathrm{e}^{\pm 2\xi}$$

从$\mathrm{e}^{-\xi\sigma_z}$右乘上式，则有

$$\mathrm{e}^{\xi\sigma_z}\sigma_\pm \mathrm{e}^{-\xi\sigma_z} = \sigma_\pm \mathrm{e}^{\pm 2\xi} \tag{3}$$

(3) **解法一**　由于

$$\sigma_x = \frac{1}{2}(\sigma_+ + \sigma_-)$$

$$\sigma_y = \frac{1}{2\mathrm{i}}(\sigma_+ - \sigma_-)$$

利用式(3)，可得

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{\xi\sigma_z}\sigma_x \mathrm{e}^{-\xi\sigma_z} &= \frac{1}{2}(\sigma_+\mathrm{e}^{2\xi} + \sigma_-\mathrm{e}^{-2\xi}) \\ &= \frac{1}{2}\sigma_x(\mathrm{e}^{2\xi} + \mathrm{e}^{-2\xi}) + \frac{\mathrm{i}}{2}\sigma_y(\mathrm{e}^{2\xi} - \mathrm{e}^{-2\xi}) \\ &= \sigma_x\cosh(2\xi) + \mathrm{i}\sigma_y\sinh(2\xi)\end{aligned} \tag{4}$$

类似地，有

$$\mathrm{e}^{\xi\sigma_z}\sigma_y \mathrm{e}^{-\xi\sigma_z} = \sigma_y\cosh(2\xi) - \mathrm{i}\sigma_x\sinh(2\xi) \tag{5}$$

解法二　利用前面所证公式

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_x \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z} = \sigma_x\cos 2\lambda - \sigma_y\sin 2\lambda \tag{6}$$

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_y \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z} = \sigma_x\sin 2\lambda + \sigma_y\cos 2\lambda \tag{7}$$

可令$\mathrm{i}\lambda = \xi$，及

$$\cosh(\mathrm{i}x) = \cos x, \qquad \sinh(\mathrm{i}x) = \mathrm{i}\sin x$$

由式(6)、式(7)给出式(4)、式(5).

类似的公式有

$$\begin{cases} e^{\lambda\sigma_y}\sigma_x e^{-\lambda\sigma_y} = \cosh(2\lambda)\sigma_x - i\sinh(2\lambda)\sigma_z \\ e^{\lambda\sigma_y}\sigma_y e^{-\lambda\sigma_y} = \cosh(2\lambda)\sigma_z + i\sinh(2\lambda)\sigma_x \end{cases}$$

$$\begin{cases} e^{\lambda\sigma_x}\sigma_y e^{-\lambda\sigma_x} = \cosh(2\lambda)\sigma_y + i\sinh(2\lambda)\sigma_z \\ e^{\lambda\sigma_x}\sigma_z e^{-\lambda\sigma_x} = \cosh(2\lambda)\sigma_z - i\sinh(2\lambda)\sigma_y \end{cases}$$

4.27　自旋态$|\lambda\rangle$的投影算子

题 4.27　向自旋态$|\lambda\rangle$的投影算子，$\Pi_\lambda = |\lambda\rangle\langle\lambda|$，证明：向$\sigma_n = 1,-1$的本征态$\alpha_n$，$\beta_n$的投影算子为

$$\Pi(\sigma_n = 1) = |\alpha_n\rangle\langle\alpha_n| = \frac{1}{2}(1 + \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})$$

$$\Pi(\sigma_n = -1) = |\beta_n\rangle\langle\beta_n| = \frac{1}{2}(1 - \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})$$

证明　在 Pauli 表象中，$\alpha_n = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2}e^{-\frac{i\varphi}{2}} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{\frac{i\varphi}{2}} \end{pmatrix}$，$\alpha_\beta = \begin{pmatrix} \sin\frac{\theta}{2}e^{-\frac{i\varphi}{2}} \\ -\cos\frac{\theta}{2}e^{\frac{i\varphi}{2}} \end{pmatrix}$

$$\Pi(\sigma_n = 1) = |\alpha_n\rangle\langle\alpha_n| = \alpha_n\alpha_n^\dagger = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2}e^{-\frac{i\varphi}{2}} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{\frac{i\varphi}{2}} \end{pmatrix}\left(\cos\frac{\theta}{2}e^{\frac{i\varphi}{2}}, \sin\frac{\theta}{2}e^{-\frac{i\varphi}{2}}\right)$$

$$= \begin{pmatrix} \cos^2\frac{\theta}{2} & \sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi} \\ \sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} & \sin^2\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(1 + \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})$$

$$\Pi(\sigma_n = -1) = |\beta_n\rangle\langle\beta_n| = \beta_n\beta_n^\dagger = \frac{1}{2}(1 - \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})$$

4.28　自旋极化矢量在均匀磁场中的动力学方程

题 4.28　在自旋态$|\lambda\rangle$中，定义自旋极化矢量$\boldsymbol{P}_\lambda = \langle\lambda|\boldsymbol{\sigma}|\lambda\rangle$，由于$\boldsymbol{P}_\lambda$是一个经过态平均的矢量，它具有一些经典性质，可以对它作普通的几何分解．自旋$s = \frac{1}{2}$粒子(旋磁比$\gamma<0$)，置于磁场B_0中，证明自旋角动量绕磁场方向匀速进动，进动角频率$\omega_0 = -\gamma B_0$.

证明 设$\boldsymbol{B}=B_0\boldsymbol{n}$，则$H=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}=-\gamma B_0 S_n=\frac{\hbar}{2}\omega_0\sigma_n$，由于

$$[\boldsymbol{S},\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{n}]=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{S}$$

故

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{S}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{S},H]=\omega_0(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{S})$$

这是$\boldsymbol{S}$绕$\boldsymbol{n}$(磁场方向)以角速度ω_0的进动方程. 同样地自旋极化矢量$\boldsymbol{P}_\lambda=\langle\lambda|\boldsymbol{\sigma}|\lambda\rangle$，也遵循同样的规律

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{P}_\lambda=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\lambda|[\boldsymbol{\sigma},H]|\lambda\rangle=\omega_0(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{P}_\lambda)$$

4.29 在σ_n本征态下的自旋极化矢量

题 4.29 证明在$\sigma_n=1,-1$的本征态$|\alpha_n\rangle,|\beta_n\rangle$下，自旋极化矢量

$$\boldsymbol{P}_+=\langle\alpha_n|\boldsymbol{\sigma}|\alpha_n\rangle=\boldsymbol{n},\qquad \boldsymbol{P}_-=\langle\beta_n|\boldsymbol{\sigma}|\beta_n\rangle=-\boldsymbol{n}$$

证明 在 Pauli 表象中

$$\alpha_n=\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}}\\ \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}}\end{pmatrix},\qquad \beta_n=\begin{pmatrix}\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}}\\ -\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}}\end{pmatrix}$$

$$\sigma_x=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\qquad \sigma_y=\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}\\ \mathrm{i}&0\end{pmatrix},\qquad \sigma_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$$

$$P_{+x}=\alpha_n^\dagger\sigma_x\alpha_n=\left(\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}},\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}}\right)\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}}\\ \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}}\end{pmatrix}=\sin\theta\cos\varphi=n_x$$

同样地

$$P_{+y}=\sin\theta\sin\varphi=n_y,\qquad P_{+z}=\cos\theta$$

即

$$\boldsymbol{P}_+=\langle\alpha_n|\boldsymbol{\sigma}|\alpha_n\rangle=\boldsymbol{n}$$

同理

$$\boldsymbol{P}_-=\langle\beta_n|\boldsymbol{\sigma}|\beta_n\rangle=-\boldsymbol{n}$$

4.30 $s=\frac{1}{2}$时极化矢量与投影算子的关系

题 4.30 $s=\frac{1}{2}$粒子在自旋态$|\lambda\rangle$中，极化矢量$\boldsymbol{P}_\lambda$与投影算子Π_λ的关系为

$$\Pi_\lambda=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{P}_\lambda\cdot\boldsymbol{\sigma})\tag{1}$$

证明 Π_λ 是个投影算子.

证明　因为

$$\Pi_\lambda^2=\frac{1}{4}\left[1+2\boldsymbol{P}_\lambda\cdot\boldsymbol{\sigma}+(\boldsymbol{P}_\lambda\cdot\boldsymbol{\sigma})^2\right]=\frac{1}{4}\left[1+2\boldsymbol{P}_\lambda\cdot\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{P}_\lambda^2+\mathrm{i}(\boldsymbol{P}\times\boldsymbol{P})\cdot\boldsymbol{\sigma}\right]$$

$$=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{P}_\lambda\cdot\boldsymbol{\sigma})=\Pi_\lambda$$

实际上，可以直接验算关系式(1)，这只要令任意自旋态为

$$|\lambda\rangle=\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}}\cos\frac{\theta}{2}\\ \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}}\sin\frac{\theta}{2}\end{pmatrix}$$

于是

$$\Pi_\lambda=|\lambda\rangle\langle\lambda|=\begin{pmatrix}\cos^2\frac{\theta}{2} & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}\\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2} & \sin^2\frac{\theta}{2}\end{pmatrix}$$

$$=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{P}_\lambda\cdot\boldsymbol{\sigma})$$

4.31　在自旋态 $|x\rangle$ 中，测得 $s=\frac{1}{2}$ 粒子处于 $|\lambda\rangle$ 态的概率

题 4.31　证明对 $s=\frac{1}{2}$ 粒子，在自旋态 $|x\rangle$ 中，测得其处于 $|\lambda\rangle$ 态的概率为

$$W_{\lambda x}=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{P}_\lambda\cdot\boldsymbol{P}_x)\tag{1}$$

证明

$$W_{\lambda x}=|\langle\lambda|x\rangle|^2=\langle x|\lambda\rangle\langle\lambda|x\rangle=\langle x|\Pi_\lambda|x\rangle=\langle x|\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{P}_\lambda\cdot\boldsymbol{\sigma})|x\rangle$$

$$=\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\langle x|\boldsymbol{P}_\lambda\cdot\boldsymbol{\sigma}|x\rangle=\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\boldsymbol{P}_\lambda\cdot\langle x|\boldsymbol{\sigma}|x\rangle=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{P}_\lambda\cdot\boldsymbol{P}_x)=W_{\lambda x}$$

作为式(1)的应用，考虑在 $\alpha=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ 态中，测 $\sigma_n=+1$ 的概率为

$$W_{\alpha_n\alpha}=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{P}_\alpha\cdot\boldsymbol{P}_{\alpha_n})$$

所以

$$W_{\alpha_n\alpha}=\frac{1}{2}(1+n_z)=\cos^2\frac{\theta}{2}$$

4.32　由测量结果确定自旋态

题 4.32　在某自旋态$|\lambda\rangle$中，测$S_z=\frac{\hbar}{2}$的概率为$\frac{1}{3}$，测$S_x=\frac{\hbar}{2}$的概率为$\frac{1}{6}$，求$|\lambda\rangle$及$\langle\lambda|S_y|\lambda\rangle$.

解法一　由于在$|\lambda\rangle$态中，测$S_z=\frac{\hbar}{2}$的概率为$\frac{1}{3}$，所以在S_z表象中

$$\lambda=\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix}1\\ \sqrt{2}e^{i\delta}\end{pmatrix}$$

其中δ为待定的实参数. 又因为$S_x=\frac{\hbar}{2}$的本征态$\alpha_x=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$,所以在$|\lambda\rangle$态下测得$S_x=\frac{\hbar}{2}$的概率为$\frac{1}{6}$，即有

$$\left|\alpha_x^{\dagger}\lambda\right|^2=\frac{1}{6}\left|(1,1)\begin{pmatrix}1\\ \sqrt{2}e^{i\delta}\end{pmatrix}\right|^2=\frac{1}{6}$$

有

$$\cos\delta=-\frac{\sqrt{2}}{2},\qquad \delta=\pm\frac{3}{4}\pi$$

故

$$\lambda_{\pm}=\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix}1\\ \sqrt{2}e^{\pm i\frac{3}{4}\pi}\end{pmatrix},\qquad \left\langle\lambda_{\pm}\middle|S_y\middle|\lambda_{\pm}\right\rangle=\lambda_{\pm}^{\dagger}S_y\lambda_{\pm}=\pm\frac{\hbar}{3}$$

解法二　设

$$\boldsymbol{P}_{\lambda}=\langle\lambda|\boldsymbol{\sigma}|\lambda\rangle=\boldsymbol{n}$$

由题设

$$\frac{1}{2}(1+n_z)=\frac{1}{3},\qquad \frac{1}{2}(1+n_x)=\frac{1}{6}$$

解出

$$\boldsymbol{n}=\left(-\frac{2}{3},\pm\frac{2}{3},-\frac{1}{3}\right)$$

故

$$\left\langle\lambda\middle|S_y\middle|\lambda\right\rangle=\frac{\hbar}{2}\left\langle\lambda\middle|\sigma_y\middle|\lambda\right\rangle=\frac{\hbar}{2}n_y=\pm\frac{\hbar}{3}$$

由于$\sigma_n=+1$的本征态，可由n_x、n_y、n_z表示为

$$\phi_1(\boldsymbol{n})=\frac{1}{\sqrt{2(1+n_z)}}\begin{pmatrix}1+n_z\\ n_x+in_y\end{pmatrix}$$

故

$$\lambda=\phi_1(\boldsymbol{n})=\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix}1\\ \sqrt{2}\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\frac{3}{4}\pi}\end{pmatrix}$$

4.33　轨道、自旋和总角动量之间的一些代数关系

题 4.33　以 $\boldsymbol{S}$ 、$\boldsymbol{L}$ 、$\boldsymbol{J}$ 表示电子的自旋、轨道及总角动量($\hbar=1$)，则

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{S}+\boldsymbol{L}=\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{L}$$

$$J^2=\frac{3}{4}+L^2+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}$$

(1) 计算$[\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}]$，$[\boldsymbol{L},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}]$，$[\boldsymbol{J},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}]$，$\left[\boldsymbol{J},L^2\right]$；(2) 求$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}$的本征值.

解　(1) 由于$\boldsymbol{\sigma}$与$\boldsymbol{L}$属不同的自由度，它们互相对易，所以

$$[\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}]=2\mathrm{i}\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{\sigma}=-2\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{L}\tag{1}$$

而

$$[\boldsymbol{L},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}]=\boldsymbol{e}_\alpha\left[L_\alpha,\sigma_\beta L_\beta\right]=\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\boldsymbol{e}_\alpha\sigma_\beta L_\gamma=\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{L}\tag{2}$$

由式(1)、式(2)，有

$$[\boldsymbol{J},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}]=[\boldsymbol{L},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}]+\frac{1}{2}[\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}]=0$$

另外

$$\left[\boldsymbol{J},L^2\right]=\left[\boldsymbol{L},L^2\right]+\left[\boldsymbol{S},L^2\right]=0$$

$$\left[L^2,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}\right]=\boldsymbol{\sigma}\cdot\left[L^2,\boldsymbol{L}\right]+\left[L^2,\boldsymbol{\sigma}\right]\cdot\boldsymbol{L}=0$$

(2) 利用公式

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})$$

有

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})^2=\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{L}+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{L})=L^2-\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}$$

对于J^2，J_z、L^2、$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}$的共同本征态

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})^2+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}-L^2=(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})^2+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}-l(l+1)=0$$

即

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}-l)(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}+l+1)=0$$

因此，$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}$的本征值为

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}=\begin{cases}l, & j=l+\dfrac{1}{2}\\ -(l+1), & j=l-\dfrac{1}{2}\end{cases}$$

4.34 总角动量的投影算子

题 4.34 对自旋$s=\frac{1}{2}$粒子，(L^2,J^2,J_z)的共同本征函数记为ϕ_{ljm_j}，相应的本征值(取$\hbar=1$)

$$L^2=l(l+1),\qquad l=0,1,2,\cdots$$

$$J^2=j(j+1),\qquad j=l+\frac{1}{2},l-\frac{1}{2}$$

$$J_z=m_j,\qquad m_j=j,j-1,\cdots,(-j)$$

在属于同一个l值的态矢量子空间，定义算符

$$\Pi_l^+=\frac{1}{2l+1}(l+1+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})$$
$$\Pi_l^-=\frac{1}{2l+1}(l-\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})\tag{1}$$

求这两个算符的主要代数关系，以及它们对ϕ_{ljm_j}的作用规则.

解 由定义式(1)可以有

$$\Pi_l^++\Pi_l^-=1$$

利用题 4.33 公式

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})^2+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}-l(l+1)=0$$

容易证明

$$(\Pi_l^+)^2=\Pi_l^+,\qquad(\Pi_l^-)^2=\Pi_l^-$$
$$\Pi_l^+\Pi_l^-=\Pi_l^-\Pi_l^+=0$$

由于ϕ_{ljm_j}也是$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}$的本征值，本征值为

$$j=l+\frac{1}{2}\text{时},\qquad\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}=l$$

$$j=l-\frac{1}{2}\text{时},\qquad\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}=-(l+1)$$

因此

$$\Pi_l^+\phi_{l,l+\frac{1}{2},m_j}=\phi_{l,l+\frac{1}{2},m_j},\qquad\Pi_l^+\phi_{l,l-\frac{1}{2},m_j}=0$$

$$\Pi_l^-\phi_{l,l-\frac{1}{2},m_j}=\phi_{l,l-\frac{1}{2},m_j},\qquad\Pi_l^-\phi_{l,l+\frac{1}{2},m_j}=0$$

由此可知，Π_l^+是$j=l+\frac{1}{2}$态的投影算符，Π_l^-是$j=l-\frac{1}{2}$态的投影算符.

4.35　σ_r 对 (L^2,J^2,J_z) 共同本征态的作用结果

题 4.35　对 $s=\frac{1}{2}$ 粒子，求算符 $\sigma_r=\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}/r$ 对 (L^2,J^2,J_z) 的共同本征态 ϕ_{ljm_j} 的作用结果(取 $\hbar=1$).

解　由于

$$[\boldsymbol{\sigma},\sigma_r]=2\mathrm{i}\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\sigma}$$

又因为

$$[\boldsymbol{L},\sigma_r]=\frac{1}{r}e_\alpha\left[L_\alpha,x_\beta\sigma_\beta\right]=\frac{1}{r}\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}e_\alpha x_\gamma\sigma_\beta=-\mathrm{i}\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\sigma}$$

所以

$$[\boldsymbol{J},\sigma_r]=[\boldsymbol{L},\sigma_r]+\frac{1}{2}[\boldsymbol{\sigma},\sigma_r]=0$$

故 σ_r 与 J^2,J_z 对易，σ_r 作用于 ϕ_{ljm_j} 的结果，量子数 j，m_j 均不变.

给定 j 和 m_j 后，ϕ_{ljm_j} 有两种，相应于 $l=j\pm\frac{1}{2}$，具体函数形式为(θ,ϕ,s_z 表象)

$$\phi^A_{jm_j}=\frac{1}{\sqrt{2l+1}}\begin{pmatrix}\sqrt{l+m+1}Y_{lm}\\ \sqrt{l-m}Y_{l,m+1}\end{pmatrix}\tag{1}$$

$$j=l+\frac{1}{2},\qquad m_j=m+\frac{1}{2}$$

$$\phi^B_{jm_j}=\frac{1}{\sqrt{2l'+1}}\begin{pmatrix}-\sqrt{l'-m}Y_{l'm}\\ \sqrt{l'+m+1}Y_{l',m+1}\end{pmatrix}$$

$$j=l'-\frac{1}{2},\qquad l'\neq 0;\qquad m_j=m+\frac{1}{2}$$

注意　对于同一 j 值，上式中 $l'=l+1$，因为 Y_{lm} 的宇称为 $(-1)^l$，所以式(1)中两种波函数宇称相反.

σ_r 是奇宇称算符，受它的作用后，波函数的宇称改变，但由于量子数 j，m_j 不变，则 σ_r 对 ϕ_{ljm_j} 作用结果必然是

$$\sigma_r\phi^A_{jm_j}=C\phi^B_{jm_j};\qquad \sigma_r\phi^B_{jm_j}=C'\phi^A_{jm_j}$$

由于 σ_r 为 Hermite 算符，且

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})^2=r^2,\qquad \sigma_r^{\ 2}=1$$

所以

$$\phi^A_{jm_j}=(\sigma_r)^2\phi^A_{jm_j}=C\sigma_r\phi^B_{jm_j}=CC'\phi^A_{jm_j}$$

因此

$$CC'=1$$

又

$$C' = \left\langle \phi^A_{jm_j} \middle| \sigma_r \middle| \phi^B_{jm_j} \right\rangle = \left\langle \phi^B_{jm_j} \middle| \sigma_r \middle| \phi^A_{jm_j} \right\rangle = C^*$$

因此

$$CC' = C^* C = 1, \qquad |C| = 1$$

再利用 σ_r 在 Pauli 表象中的矩阵表示

$$\sigma_r = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix}$$

并利用球谐函数递推公式，可计算出 $C = C' = -1$，即

$$\sigma_r \phi^A_{jm_j} = -\phi^B_{jm_j}; \qquad \sigma_r \phi^B_{jm_j} = -\phi^A_{jm_j}$$

4.36　在态 Y_{l0} 下 J^2 、J_z 的可能值及相应概率

题 4.36　$s = \frac{1}{2}$ 粒子，S_z 的本征态常记为 $\alpha = \chi_{1/2}$，$\beta = \chi_{-1/2}$，求在态 αY_{l0} 下，J^2 、J_z 的可能值及相应概率(取 $\hbar = 1$).

解法一　αY_{l0} 显然是 L^2, L_z, σ_z, J_z 的共同本征态，本征值为

$$L^2 = l(l+1), \qquad L_z = 0, \qquad \sigma_z = 1, \qquad j_z = \frac{1}{2}$$

J^2 本征值为 $j(j+1)$，$j = l \pm \frac{1}{2}$，将 αY_{l0} 表示为 (L^2, J^2, J_z) 的共同本征态的线性叠加，必为

$$\alpha Y_{l0} = C_1 \phi_{l,l+\frac{1}{2},\frac{1}{2}} + C_2 \phi_{l,l-\frac{1}{2},\frac{1}{2}}$$

由于

$$\phi_{l,l+\frac{1}{2},\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{l+1}{2l+1}} \alpha Y_{l0} + \sqrt{\frac{l}{2l+1}} \beta Y_{l1}$$

$$\phi_{l,l-\frac{1}{2},\frac{1}{2}} = -\sqrt{\frac{l}{2l+1}} \alpha Y_{l0} + \sqrt{\frac{l+1}{2l+1}} \beta Y_{l1}$$

可有

$$C_1 = \left\langle \phi_{l,l+\frac{1}{2},\frac{1}{2}} \middle| \alpha Y_{l0} \right\rangle = \sqrt{\frac{l+1}{2l+1}}, \qquad C_2 = \left\langle \phi_{l,l-\frac{1}{2},\frac{1}{2}} \middle| \alpha Y_{l0} \right\rangle = -\sqrt{\frac{l}{2l+1}}$$

因此，测得 $J^2 = \left(l + \frac{1}{2}\right)\left(l + \frac{3}{2}\right)$ 的概率为 $\frac{l+1}{2l+1}$，测得 $J^2 = \left(l - \frac{1}{2}\right)\left(l + \frac{1}{2}\right)$ 的概率为 $\frac{l}{2l+1}$.

解法二　设 $j = l + \frac{1}{2}$ 的概率为 P，则 $j = l - \frac{1}{2}$ 的概率为 $(1-P)$

$$\left\langle J^2 \right\rangle = \left(l + \frac{1}{2}\right)\left(l + \frac{3}{2}\right) P + \left(l - \frac{1}{2}\right)\left(l + \frac{1}{2}\right)(1-P)$$

$$= (2l+1)P + l^2 - \frac{1}{4} \tag{1}$$

因为

$$J^2 = L^2 + \frac{3}{4} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{L}$$

由于在态αY_{l0}中$\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = \langle L_z \rangle = 0$，所以

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{L} \rangle = \langle \alpha | \boldsymbol{\sigma} | \alpha \rangle \cdot \langle Y_{l0} | \boldsymbol{L} | Y_{l0} \rangle = 0$$

于是

$$\langle J^2 \rangle = l(l+1) + \frac{3}{4} \tag{2}$$

由式(1)、式(2)可得

$$P = \frac{l+1}{2l+1}, \qquad 1 - P = \frac{l}{2l+1}$$

4.37　在(L^2, J^2, J_z)的共同本征态下求$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$

题 4.37　自旋$s = \frac{1}{2}$粒子，处于(L^2, J^2, J_z)的共同本征态$|ljm_j\rangle$下，证明

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \langle \boldsymbol{J} \rangle \left[\frac{j(j+1) - l(l+1) + \frac{3}{4}}{j(j+1)} \right], \qquad 取\ \hbar = 1$$

证明　利用$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{A}) + (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{A})\boldsymbol{\sigma} = 2\boldsymbol{A}$，可得

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{L}) + (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{L})\boldsymbol{\sigma} = 2\boldsymbol{L} \tag{1}$$

式(1)在$|ljm_j\rangle$态下求平均，由于$|ljm_j\rangle$也是$\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{L}$的本征态，故得

$$\begin{aligned} \langle ljm_j | \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{L}) | ljm_j \rangle &= \langle ljm_j | (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{L})\boldsymbol{\sigma} | ljm_j \rangle \\ &= \langle ljm_j | \boldsymbol{\sigma} | ljm_j \rangle (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{L})_{本征值} \end{aligned}$$

因此

$$\langle \boldsymbol{L} \rangle = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{L})_{本征值}$$

$$\langle \boldsymbol{J} \rangle = \left\langle \boldsymbol{L} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma} \right\rangle = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \left(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{L} + \frac{1}{2} \right)_{本征值} \tag{2}$$

利用公式

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{L})^2 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{L} - L^2 = 0$$

可得

$$J^2 = L^2 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{L} + \frac{3}{4} = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{L})^2 + 2(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{L}) + \frac{3}{4} = \left(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{L} + \frac{1}{2} \right) \left(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{L} + \frac{3}{2} \right)$$

因此式(2)两端各乘以$\left(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{L} + \frac{3}{2} \right)_{本征值}$，即得

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle (J^2)_{本征值} = \langle \boldsymbol{J} \rangle \left(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{L} + \frac{3}{2} \right)_{本征值} = \langle \boldsymbol{J} \rangle \left(J^2 - L^2 + \frac{3}{4} \right)_{本征值}$$

于是

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \langle \boldsymbol{J} \rangle \left[\frac{j(j+1) - l(l+1) + \frac{3}{4}}{j(j+1)} \right]$$

因为在$|ljm_j\rangle$态下，$\langle J_x \rangle = \langle J_y \rangle = 0$，$\langle J_z \rangle = m_j$，上式即

$$\langle \sigma_x \rangle = \langle \sigma_y \rangle = 0$$

$$\langle \sigma_z \rangle = m_j \left[\frac{j(j+1) - l(l+1) + \frac{3}{4}}{j(j+1)} \right] = \begin{cases} \dfrac{m_j}{j}, & j = l + \dfrac{1}{2} \\ -\dfrac{m_j}{j+1}, & j = l - \dfrac{1}{2} \end{cases}$$

进一步，利用

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{J} - \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}$$

可得$\boldsymbol{L}$在$|ljm_j\rangle$态下之平均值为

$$\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0, \qquad \langle L_z \rangle = m_j - \frac{1}{2} \langle \sigma_z \rangle = m_j \frac{j(j+1) + l(l+1) - \frac{3}{4}}{2j(j+1)}$$

4.38 在$|ljm_j\rangle$态下求总磁矩分量μ_z的平均值

题 4.38 电子的总磁矩(算符)为

$$\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_L + \boldsymbol{\mu}_S = -\frac{e}{2m_e}(\boldsymbol{L} + 2\boldsymbol{S})$$

对$|ljm_j\rangle$态计算μ_z的平均值.

解 以 Bohr 磁子$\mu_B = e\hbar / 2m_e$作为磁矩单位，电子磁矩可写为(取$\hbar = 1$)

$$\boldsymbol{\mu} = -(\boldsymbol{L} + 2\boldsymbol{S}) = -(\boldsymbol{J} + \boldsymbol{S}) = -\left(\boldsymbol{J} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \right)$$

利用题 4.37 结果，即得

$$\langle ljm_j | \mu_z | ljm_j \rangle = -g m_j$$

其中 Lande g 因子

$$g = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{2j(j+1)}$$

4.39 $\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2$满足的最简单代数关系

题 4.39 $\boldsymbol{\sigma}_1$，$\boldsymbol{\sigma}_2$分别是两个自旋$s = \frac{1}{2}$粒子的 Pauli 算符，(1) 证明

$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)^2+2\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2-3=0$；(2) 求 $\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$ 的本征值，本征态.

解 (1)
$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}+\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})$$

其中，$\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$ 皆与 $\boldsymbol{\sigma}$ 对易. 令 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}=\boldsymbol{\sigma}_2$，$\boldsymbol{\sigma}=\boldsymbol{\sigma}_1$ 且 $\boldsymbol{\sigma}_2^2=3$ 以及 $\boldsymbol{\sigma}_2\times\boldsymbol{\sigma}_2=2\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_2$，故

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)^2=3-2(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2) \tag{1}$$

(2) 式(1)为算符 $\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$ 满足的最简单的代数关系，也是其本征值满足的代数方程，所以 $\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$ 的本征值为 1，-3. 相应的本征态为 S^2、$S_z\left(\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2=\dfrac{\hbar}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)\right)$ 的共同本征态 χ_{SM_S}

$$\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2\chi_{1M_S}=\chi_{1M_S}；\qquad \boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2\chi_{00}=-3\chi_{00}$$

4.40　自旋交换算符

题 4.40　对两个自旋 $\dfrac{1}{2}$ 粒子组成的体系，定义自旋交换算符 P_{12}，$P_{12}=\dfrac{1}{2}(1+\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)$. (1) 求 P_{12} 的本征值，本征态；(2) 证明 $P_{12}\alpha(1)\beta(2)=\beta(1)\alpha(2)$，$P_{12}\beta(1)\alpha(2)=\alpha(1)\beta(2)$；(3) 证明 $P_{12}\boldsymbol{\sigma}_1P_{12}=\boldsymbol{\sigma}_2$，$P_{12}\boldsymbol{\sigma}_2P_{12}=\boldsymbol{\sigma}_1$.

解 (1)
$$P_{12}^2=\frac{1}{4}(1+\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)^2=\frac{1}{4}\left[1+2\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2+(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)^2\right]=\frac{1}{4}\left[1+2\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2+(3-2\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\right]=1$$

故　$P_{12}^{-1}=P_{12}$，且 P_{12} 的本征值为 ±1，显然三重态 χ_{1M} 是 $P_{12}=1$ 的本征态，单态 χ_{00} 为 $P_{12}=-1$ 的本征态，这是因为

$$P_{12}\chi_{1M}=\chi_{1M}，\qquad P_{12}X_{00}=-\chi_{00}$$

(2) 由于

$$\alpha(1)\beta(2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\chi_{10}+\chi_{00}\right)，\qquad \beta(1)\alpha(2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\chi_{10}-\chi_{00}\right)$$

所以

$$P_{12}\alpha(1)\beta(2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\chi_{10}-\chi_{00}\right)=\beta(1)\alpha(2)$$
$$P_{12}\beta(1)\alpha(2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\chi_{10}+\chi_{00}\right)=\alpha(1)\beta(2)$$

(3) 由于

$$\boldsymbol{\sigma}_1(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)=\boldsymbol{e}_\alpha\sigma_{1\alpha}(\sigma_{1\beta}\sigma_{2\beta})=\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\boldsymbol{e}_\alpha\sigma_{1\gamma}\sigma_{2\beta}+\delta_{\alpha\beta}\boldsymbol{e}_\alpha\sigma_{2\beta}=-\mathrm{i}(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)+\boldsymbol{\sigma}_2$$
$$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\boldsymbol{\sigma}_2=\sigma_{1\alpha}\sigma_{2\alpha}\sigma_{2\beta}\boldsymbol{e}_\beta=\boldsymbol{\sigma}_1-\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$$

所以

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma}_1P_{12}&=\frac{1}{2}\left[\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_1(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\right]=\frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_2+\boldsymbol{\sigma}_1-\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)\\&=\frac{1}{2}\left[\boldsymbol{\sigma}_2+(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\boldsymbol{\sigma}_2\right]=\frac{1}{2}\left[1+(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\right]\boldsymbol{\sigma}_2=P_{12}\boldsymbol{\sigma}_2\end{aligned} \tag{1}$$

且由于$P_{12}^{-1}=P_{12}$，式(1)两边分别左乘和右乘P_{12}，有

$$P_{12}\boldsymbol{\sigma}_1P_{12}=\boldsymbol{\sigma}_2,\qquad P_{12}\boldsymbol{\sigma}_2P_{12}=\boldsymbol{\sigma}_1$$

4.41 两个自旋$\frac{1}{2}$粒子的两体算符$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2}$的展开

题 4.41 展开两个自旋$\frac{1}{2}$粒子的两体算符$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2}$ (**提示** 用自旋交换算符P_{12}，代替$\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$).

解法一 将$\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2=2P_{12}-1$代入两体算符，可得

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2}&=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\alpha P_{12}}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2\mathrm{i}\alpha)^n}{n!}P_{12}^n\\&=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}(\cos2\alpha+\mathrm{i}P_{12}\sin2\alpha)\\&=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}\left[\cos2\alpha+\frac{\mathrm{i}}{2}\sin2\alpha(1+\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\right]\end{aligned}$$

解法二 因$P_{12}^2=1$，$P_{12}=\pm1$，其中$P_{12}=1$为三重简并，得

$$\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\alpha P_{12}}=C_0+C_1P_{12}$$

将其作用到P_{12}的本征值为±1的本征态上有

$$C_0+C_1=\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\alpha},\qquad C_0-C_1=\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\alpha}$$

解出

$$C_0=\cos2\alpha,\qquad C_1=\mathrm{i}\sin2\alpha,\qquad \mathrm{e}^{2\mathrm{i}\alpha P_{12}}=\cos2\alpha+\mathrm{i}P_{12}\sin2\alpha$$

4.42 两个自旋$\frac{1}{2}$粒子的 Pauli 算符的一些代数结果

题 4.42 两个自旋$\frac{1}{2}$粒子组成的体系，$\boldsymbol{\sigma}_1$、$\boldsymbol{\sigma}_2$分别为两个粒子的 Pauli 算符，证明 (1)

$$\boldsymbol{\sigma}_1\cdot(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)=2\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$$
$$\boldsymbol{\sigma}_2\cdot(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)=-2\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$$

(2)

$$\boldsymbol{\sigma}_1(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)=\boldsymbol{\sigma}_2-\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{1}$$
$$\boldsymbol{\sigma}_2(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)=\boldsymbol{\sigma}_1+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{2}$$
$$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\boldsymbol{\sigma}_1=\boldsymbol{\sigma}_2+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{3}$$
$$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\boldsymbol{\sigma}_2=\boldsymbol{\sigma}_1-\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{4}$$

(3)

$$\boldsymbol{\sigma}_1\times(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)=\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2-2\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{5}$$
$$(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)\times\boldsymbol{\sigma}_1=\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2+2\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{6}$$
$$\boldsymbol{\sigma}_2\times(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)=\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2+2\boldsymbol{\sigma}_1 \tag{7}$$
$$(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)\times\boldsymbol{\sigma}_2=\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2-2\boldsymbol{\sigma}_1 \tag{8}$$

证明 (1) 注意到$\boldsymbol{\sigma}_1$、$\boldsymbol{\sigma}_2$互易

$$\boldsymbol{\sigma}_1\cdot(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)=(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_1)\cdot\boldsymbol{\sigma}_2=2\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$$

$$\boldsymbol{\sigma}_2\cdot(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)=-\boldsymbol{\sigma}_2\cdot(\boldsymbol{\sigma}_2\times\boldsymbol{\sigma}_1)=-(\boldsymbol{\sigma}_2\times\boldsymbol{\sigma}_2)\cdot\boldsymbol{\sigma}_1=-2\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$$

(2) 由于，若$\boldsymbol{A}$与$\boldsymbol{\sigma}$对易，则有

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})-\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}-(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{\sigma}=\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma}$$

在上式中，令$\boldsymbol{\sigma}$和$\boldsymbol{A}$一个等于$\boldsymbol{\sigma}_1$，另一个等于$\boldsymbol{\sigma}_2$，则有

$$\boldsymbol{\sigma}_1(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)=\boldsymbol{\sigma}_2-\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2$$

$$\boldsymbol{\sigma}_2(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)=\boldsymbol{\sigma}_1+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2$$

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\boldsymbol{\sigma}_1=\boldsymbol{\sigma}_2+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2$$

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\boldsymbol{\sigma}_2=\boldsymbol{\sigma}_1-\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2$$

另外式(3)、式(1)相减，式(4)、式(2)相减，有

$$[\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2,\boldsymbol{\sigma}_1]=2\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2$$

$$[\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2,\boldsymbol{\sigma}_2]=-2\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2$$

(3) 利用公式

$$\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})=A_\alpha\boldsymbol{B}C_\alpha-(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})\boldsymbol{C}$$

$$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\times\boldsymbol{C}=A_\alpha\boldsymbol{B}C_\alpha-\boldsymbol{A}(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{C})$$

且注意到$\boldsymbol{\sigma}_1$、$\boldsymbol{\sigma}_2$互易，则

$$\boldsymbol{\sigma}_1\times(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)=(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\boldsymbol{\sigma}_1-(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_1)\boldsymbol{\sigma}_2=(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\boldsymbol{\sigma}_1-3\boldsymbol{\sigma}_2$$

再利用式(3)有

$$\boldsymbol{\sigma}_1\times(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)=\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2-2\boldsymbol{\sigma}_2$$

则式(5)得证. 式(6)、式(7)、式(8)证明，完全类似.

4.43　两个自旋$\frac{1}{2}$粒子自旋算符和总自旋算符的一些代数结果

题 4.43　对两个自旋$\frac{1}{2}$粒子组成的体系，总自旋$\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2$

证明 (取$\hbar=1$)

$$\boldsymbol{S}(\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2)=(\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2)\boldsymbol{S}=\frac{1}{4}\boldsymbol{S}$$

$$\boldsymbol{S}\cdot(\boldsymbol{S}_1\times\boldsymbol{S}_2)=(\boldsymbol{S}_1\times\boldsymbol{S}_2)\cdot\boldsymbol{S}=0$$

$$\boldsymbol{S}S^2=S^2\boldsymbol{S}=2\boldsymbol{S}\tag{1}$$

$$S_n^4=S_n^2$$

证明 因

$$\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2=\frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2),\qquad \boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2=\frac{1}{4}\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$$

利用题 4.42 式(1)、式(2)、式(3)、式(4)，得

$$S(S_1 \cdot S_2)=\frac{1}{8}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)=\frac{1}{8}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)$$

$$=\frac{1}{4}S=(S_1\cdot S_2)S$$

利用题 4.42 公式

$$\boldsymbol{\sigma}_1\cdot(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)=2\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{2}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_2\cdot(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)=-2\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{3}$$

容易得出

$$S\cdot(S_1\times S_2)=\frac{1}{8}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)\cdot(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)=0$$

式(2)、式(3)取共轭，有

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)\cdot\boldsymbol{\sigma}_1=-2\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$$

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)\cdot\boldsymbol{\sigma}_2=2\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$$

可有

$$(S_1\times S_2)\cdot S=0$$

由于　$S^2=\frac{3}{2}+\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$，$\left[S^2,S\right]=0$，故

$$SS^2=\frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)\left(\frac{3}{2}+\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2\right)$$

$$=\frac{3}{4}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)+\frac{1}{4}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)$$

利用题 4.42 式(1)、式(2)，有

$$(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)=\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2$$

因此

$$SS^2=\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2=2S=S^2S$$

由于

$$S_n=S\cdot n=\frac{1}{2}(\sigma_{1n}+\sigma_{2n})$$

所以

$$S_n^2=\frac{1}{4}\left(\sigma_{1n}^2+\sigma_{2n}^2+2\sigma_{1n}\sigma_{2n}\right)=\frac{1}{2}(1+\sigma_{1n}\sigma_{2n})$$

$$S_n^4=\frac{1}{4}\left(1+\sigma_{1n}^2\sigma_{2n}^2+2\sigma_{1n}\sigma_{2n}\right)=\frac{1}{2}(1+\sigma_{1n}\sigma_{2n})=S_n^2$$

另外式(1)两边以 S 点乘，有

$$S^4=2S^2$$

4.44　张量算符 $S_{12}=3(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot n)(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot n)-\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$

题 4.44　对于两个自旋 $\frac{1}{2}$ 的粒子系，令 $r=r_1-r_2$，$n=\frac{r}{r}$，定义张量算符(取 $\hbar=1$)

$$S_{12}=3(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{n})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{n})-\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$$

(1) 证明 $S_{12}^2=4S^2-2S_{12}$，其中 $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2$；(2) 求 S_{12} 的本征值.

解法一

$$\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2=\frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)$$

$$S^2=\frac{3}{2}+\frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)$$

$$S_n=\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{n}=\frac{1}{2}(\sigma_{1n}+\sigma_{2n})$$

$$S_n^2=\frac{1}{2}(1+\sigma_{1n}\sigma_{2n})$$

所以，S_{12} 可表示为

$$S_{12}=3\sigma_{1n}\sigma_{2n}-\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2=6S_n^2-2S^2 \tag{1}$$

于是

$$(S_{12})^2=36S_n^4+4S^4-12(S_n^2S^2+S^2S_n^2) \tag{2}$$

由题 4.43 结果

$$S_n^4=S_n^2 \tag{3}$$

$$\boldsymbol{S}S^2=S^2\boldsymbol{S}=2\boldsymbol{S} \tag{4}$$

$$S^4=2S^2 \tag{5}$$

式(4)两端取 $\boldsymbol{n}$ 方向投影，得到

$$S_nS^2=S^2S_n=2S_n \tag{6}$$

将上述关系代入式(2)，有

$$(S_{12})^2=4S^2-2S_{12} \tag{7}$$

(2) 式(1)、式(7)表明 S_{12}、S_n 及 S^2 均对易，以 S^2 乘式(1)并利用式(5)、式(6)，可得

$$S_{12}S^2=S^2S_{12}=2S_{12} \tag{8}$$

以 S_{12} 乘式(7)，并利用式(8)，即得 S_{12} 满足的最简单代数方程

$$(S_{12})^2+2(S_{12})^2-8S_{12}=0$$

由此解出 S_{12} 的本征值为

$$S_{12}=2,\quad 0,\quad -4$$

解法二　由于 $\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{n}=2\Pi_{n1}-1$，这里 Π_{n1} 是第一个粒子自旋态向极化矢量在 $\boldsymbol{n}=\frac{\boldsymbol{r}}{r}$ 方向的态投影的投影算子，于是 S_{12} 改写为

$$S_{12}=3(2\Pi_{n1}-1)(2\Pi_{n2}-1)-(2P_{12}-1)$$

考虑到 $\Pi_{ni}^2=\Pi_{ni}$，及 $P_{12}^2=1$ 和 $S_{12}P_{12}=P_{12}S_{12}$，有

$$\begin{aligned}S_{12}^2&=9(2\Pi_{n1}-1)^2(2\Pi_{n2}-1)^2-6(2\Pi_{n1}-1)(2\Pi_{n2}-1)(2P_{12}-1)+(2P_{12}-1)^2\\&=9-6(2\Pi_{n1}-1)(2\Pi_{n2}-1)(2P_{12}-1)+(2P_{12}-1)^2\end{aligned}$$

$$=9-2\left[S_{12}+(2P_{12}-1)\right](2P_{12}-1)+(2P_{12}-1)^2$$

$$=9-2(2P_{12}-1)S_{12}-(5-4P_{12})$$

$$=6+2\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2-2\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2S_{12}$$

由于

$$\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2S_{12}=S_{12} \tag{1}$$

所以有

$$\left(S_{12}\right)^2=4S^2-2S_{12}$$

其中式(1)证明如下

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)^2=3-2\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$$

$$\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{n}\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{n}=\sigma_{1\alpha}\sigma_{2\alpha}\sigma_{1\beta}\sigma_{2\gamma}n_\beta n_\gamma=\left(\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\theta}\sigma_{1\theta}+\delta_{\alpha\beta}\right)\left(\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\gamma\tau}\sigma_{2\tau}+\delta_{\alpha\gamma}\right)n_\beta n_\gamma$$

$$=-\varepsilon_{\alpha\beta\theta}\varepsilon_{\alpha\gamma\tau}\sigma_{1\theta}\sigma_{2\tau}n_\beta n_\gamma+\delta_{\alpha\beta}\delta_{\alpha\gamma}n_\beta n_\gamma+\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\theta}\delta_{\alpha\gamma}\sigma_{1\theta}n_\beta n_\gamma \tag{2}$$

$$+\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\gamma\tau}\delta_{\alpha\beta}\delta_{2\tau}n_\beta n_\gamma$$

式(2)第三项为$\boldsymbol{\sigma}_1\cdot(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{n})=0$，第四项为$\boldsymbol{\sigma}_2\cdot(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{n})=0$，第二项为$\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{n}=1$，第一项利用公式

$$\varepsilon_{\alpha\beta\theta}\varepsilon_{\alpha\gamma\tau}=\delta_{\beta\gamma}\delta_{\theta\tau}-\delta_{\beta\tau}\delta_{\theta\gamma}$$

计算结果为$\sigma_{1n}\sigma_{2n}-\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$，即

$$\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2\sigma_{1n}\sigma_{2n}=\sigma_{1n}\sigma_{2n}-\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2+1 \tag{3}$$

利用式(2)、式(3)，立即可得

$$\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2S_{12}=S_{12}$$

4.45　两电子原子处于自旋单态时，L-S 耦合对能量无贡献

题 4.45　一个具有两个电子的原子，处于单态($S=0$). 证明：自旋−轨道耦合作用$\xi(r)\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}$对能量无贡献.

证明　$\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}=\frac{1}{2}(J^2-L^2-S^2)$，在$S=0$的单态$|0\rangle$中，有

$$S=0,\qquad j=l$$

$$\langle 0|\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}|0\rangle=\frac{1}{2}(j(j+1)-l(l+1))=0$$

即$\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}$对能量无贡献.

4.46　两个$S=\frac{1}{2}$非全同粒子的自旋状态中，S^2的可能测量值及相应概率

题 4.46　某物理体系由两个自旋$\frac{1}{2}$的非全同粒子组成. 已知粒子 1 处于$S_{1z}=\frac{1}{2}$的本征态，粒子 2 处于$S_{2x}=\frac{1}{2}$的本征态，求体系总自旋S^2的可能测量值及相应的概率(取$\hbar=1$).

解　$S_{1z}=\pm\frac{1}{2}$的单粒子自旋态记为$\alpha(1),\beta(1)$，在 Pauli 表象中$\alpha=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$，$\beta=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$.

$S_{2x}=\frac{1}{2}$的单自旋态为

$$\psi(2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}_2=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(2)+\beta(2)]$$

因此，体系的自旋态为

$$\chi(1,2)=\alpha(1)\psi(2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\alpha(2)+\beta(1)\beta(2)]$$

总自旋S^2共有两个本征值：0 和 2. $S^2=0$的本征态为

$$\chi_{00}(1,2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)]$$

在体系的自旋态χ中测得$S^2=0$的概率为$|\langle\chi_{00}|\chi\rangle|^2$. 根据$\alpha,\beta$的正交归一性

$$\langle\alpha|\alpha\rangle=\langle\beta|\beta\rangle=1,\qquad \langle\alpha|\beta\rangle=\langle\beta|\alpha\rangle=0$$

容易求出

$$\langle\chi_{00}|\chi\rangle=\frac{1}{2}$$

因此，测得$S^2=0$的概率为$\frac{1}{4}$，从而测得$S^2=2$的概率为$\left(1-\frac{1}{4}\right)=\frac{3}{4}$.

4.47　两个自旋$\frac{1}{2}$粒子系受均匀外磁场作用时的能级

题 4.47　由两个自旋$\frac{1}{2}$粒子组成的体系，置于均匀磁场中，如以磁场方向作为z轴方向，与自旋有关的体系 Hamilton 量为

$$H=a\sigma_{1z}+b\sigma_{2z}+c_0\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$$

其中a,b项来自磁场与粒子内禀磁矩的作用，c_0项来自两个粒子的相互作用. a,b,c_0均为实常数.(对于全同粒子，$a=b$，非全同粒子，一般$a\neq b$). 试求体系的能级.

解　我们将在自旋态矢量空间中，用矩阵的方法求解. 基矢可以取为(σ_{1z},σ_{2z})的共同本征态.

$$\alpha(1)\alpha(2),\qquad \alpha(1)\beta(2),\qquad \beta(1)\alpha(2),\qquad \beta(1)\beta(2)$$

也可以取为总自旋算符(S^2,S_z)的共同本征态χ_{SM_S}. 对于本题，从$\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$的对角化考虑，采用$\chi_{SM_S}$作为基矢较为方便. 为叙述方便，基矢的编号顺序如下

$$\chi_1=\chi_{11}=\alpha(1)\alpha(2)$$
$$\chi_2=\chi_{1,-1}=\beta(1)\beta(2)$$
$$\chi_3=\chi_{10}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)+\beta(1)\alpha(2)]$$

$$\chi_4 = \chi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)]$$

将 Hamilton 量算符改写为

$$H = c_0\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 + c_1(\sigma_{1z} + \sigma_{2z}) + c_2(\sigma_{1z} - \sigma_{2z})$$

$$c_1 = \frac{1}{2}(a+b), \qquad c_2 = \frac{1}{2}(a-b)$$

四个基矢都是(S^2, S_z)的共同本征态，即都是$\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2$和$(\sigma_{1z} + \sigma_{2z})$的共同本征态. 容易看出$\chi_1$和$\chi_2$也是$\sigma_{1z} - \sigma_{2z}$的本征态，因而$\chi_1$和$\chi_2$已经是$H$的本征态.

$$H\chi_1 = (c_0 + 2c_1)\chi_1 = (c_0 + a + b)\chi_1$$

$$H\chi_2 = (c_0 - 2c_1)\chi_1 = (c_0 - a - b)\chi_1$$

这样我们就得到了体系的两个能级

$$E = c_0 \pm 2c_1$$

容易算出$(\sigma_{1z} - \sigma_{2z})$对基矢的作用结果，为

$$(\sigma_{1z} - \sigma_{2z})\chi_1 = 0, \qquad (\sigma_{1z} - \sigma_{2z})\chi_2 = 0$$

$$(\sigma_{1z} - \sigma_{2z})\chi_3 = \chi_4, \qquad (\sigma_{1z} - \sigma_{2z})\chi_4 = 2\chi_3$$

因此，在$\{\chi_3, \chi_4\}$子空间中，$(\sigma_{1z} - \sigma_{2z})$的矩阵元为

$$(\sigma_{1z} - \sigma_{2z})_{33} = (\sigma_{1z} - \sigma_{2z})\chi_{44} = 0$$

$$(\sigma_{1z} - \sigma_{2z})_{34} = (\sigma_{1z} - \sigma_{2z})\chi_{43} = 2$$

$(\sigma_{1z} + \sigma_{2z})$的全部矩阵元为 0，$H$ 的矩阵表示为

$$H = \begin{pmatrix} c_0 & 2c_2 \\ 2c_2 & -3c_0 \end{pmatrix}$$

设能量的本征态为

$$\chi = f_3\chi_3 + f_4\chi_4$$

代入能量本征方程

$$H\chi = E\chi$$

得到

$$\begin{pmatrix} c_0 - E & 2c_2 \\ 2c_2 & -3c_0 - E \end{pmatrix}\begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = 0$$

能级E由下式决定

$$\det(H - E) = 0$$

即

$$\begin{pmatrix} c_0 - E & 2c_2 \\ 2c_2 & -3c_0 - E \end{pmatrix} = (E - c_0)(E + 3c_0) - 4c_2^2 = 0$$

解得

$$E = -c_0 \pm 2\sqrt{c_0^2 + c_2^2}$$

结论 本题共有四个能级(不考虑偶然简并)，它们是

$$E = c_0 \pm 2c_1, \qquad -c_0 \pm 2\sqrt{c_0^2 + c_2^2}$$

前两个能级的能量本征态分别为χ_1和χ_2，后两个能级的能量本征态为χ_3和χ_4的线性叠加.

4.48　三个自旋$\frac{1}{2}$粒子系统求体系的能级和简并度

题 4.48　考虑由三个自旋$\frac{1}{2}$的可分辨粒子组成的体系，Hamilton 量为

$$H = A(\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2+\boldsymbol{S}_2\cdot\boldsymbol{S}_3+\boldsymbol{S}_3\cdot\boldsymbol{S}_1)\,,\qquad A\text{ 为实数}$$

(1) 求体系的能级和简并度 (取$\hbar=1$). (2) 找一个守恒量完全集，求出其共同本征函数，从而得到一些正交完备的能量本征函数.

解　(1) 令

$$\boldsymbol{S}'=\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2,\qquad \boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2+\boldsymbol{S}_3=\boldsymbol{S}'+\boldsymbol{S}_3$$

显然有

$$\boldsymbol{S}'\times\boldsymbol{S}'=\mathrm{i}\boldsymbol{S}',\qquad \left[(\boldsymbol{S}')^2,\boldsymbol{S}'\right]=0;\qquad \boldsymbol{S}\times\boldsymbol{S}=\mathrm{i}\boldsymbol{S},\qquad \left[\boldsymbol{S}^2,\boldsymbol{S}\right]=0$$

$\boldsymbol{S}_1$，$\boldsymbol{S}_2$，$\boldsymbol{S}_3$互相对易，而且

$$\boldsymbol{S}_1^2=\boldsymbol{S}_2^2=\boldsymbol{S}_3^2=\frac{3}{4}$$

因此

$$(\boldsymbol{S}')^2=\frac{3}{2}+2\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2,\qquad \boldsymbol{S}^2=\frac{9}{4}+2(\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2+\boldsymbol{S}_2\cdot\boldsymbol{S}_3+\boldsymbol{S}_3\cdot\boldsymbol{S}_1)$$

因此H可写为

$$H=\frac{A}{2}\left(\boldsymbol{S}^2-\frac{9}{4}\right)$$

因此能级为

$$E_s=\frac{A}{2}\left[S(S+1)-\frac{9}{4}\right]$$

(2) 守恒量完全集取为$\left\{\boldsymbol{S}^2,S_z,(\boldsymbol{S}')^2\right\}$，相应的量子数$S'$，$S$的可能组合为

$$\left.\begin{array}{ll} S=\frac{3}{2}, & S'=1\\ S=\frac{1}{2}, & S'=1,0\end{array}\right\}$$

对每组(S,S')，能级的简并度为$(2S+1)$，所以

$$E_{3/2}=\frac{3}{4}A,\quad S=\frac{3}{2},\quad S'=1\text{，简并度为 }4$$

$$E_{1/2}=-\frac{3}{4}A,\quad S=\frac{1}{2},\quad S'=1,0\text{，简并度为 }4$$

下面设法确定$\left(\boldsymbol{S}^2,S_z,(\boldsymbol{S}')^2\right)$的共同本征态，第 i 个粒子的S_{iz}的本征态记为$\alpha(i),\beta(i)$，$i=1,2,3$. 将$\boldsymbol{S}^2,S_z,(\boldsymbol{S}')^2$的共同本征态记为$\chi_{S'SM}(1,2,3)$. 显然

$$\chi_{1,\frac{3}{2},\frac{3}{2}}=\alpha(1)\alpha(2)\alpha(3)$$

将总自旋降算符 $S_-=S_x-iS_y=S_{1-}+S_{2-}+S_{3-}$，重复作用于 $\chi_{1,\frac{3}{2},\frac{3}{2}}$，求出 $\chi_{1,\frac{3}{2},M}\left(M=\frac{1}{2},-\frac{1}{2},-\frac{3}{2}\right)$诸态为

$$\chi_{1,\frac{3}{2},\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{3}}[\alpha(1)\alpha(2)\beta(3)+\beta(1)\alpha(2)\alpha(3)+\alpha(1)\beta(2)\alpha(3)]$$

$$\chi_{1,\frac{3}{2},-\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{3}}[\alpha(1)\beta(2)\beta(3)+\beta(1)\alpha(2)\beta(3)+\beta(1)\beta(2)\alpha(3)]$$

$$\chi_{1,\frac{3}{2},-\frac{3}{2}}=\beta(1)\beta(2)\beta(3)$$

$S'=0$时，体系波函数中关于粒子 1、2 部分只能是

$$\chi_{00}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)]$$

进一步考虑到$M=\frac{1}{2}$，所以

$$\chi_{0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}}=\chi_{00}(1,2)\alpha(3)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)\alpha(3)-\beta(1)\alpha(2)\alpha(3)]$$

$$\chi_{0,\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}=\chi_{00}(1,2)\beta(3)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)\beta(3)-\beta(1)\alpha(2)\beta(3)]$$

现在只有 $\chi_{1,\frac{1}{2},\frac{1}{2}}$ 和 $\chi_{1,\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}$ 有待确定. $\chi_{1,\frac{1}{2},\frac{1}{2}}$ 的每一项应包含两个 α 态，一个 β 态，它是 $\chi_{11}(1,2)\beta(3)$ 和 $\chi_{10}(1,2)\alpha(3)$ 的叠加态，且应该和 $\chi_{1,\frac{3}{2},\frac{1}{2}}$ 正交. $\chi_{1,\frac{3}{2},\frac{1}{2}}$ 可表示为

$$\chi_{1,\frac{3}{2},\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{3}}\left[\chi_{11}(1,2)\beta(3)+\sqrt{2}\chi_{10}(1,2)\alpha(3)\right]$$

因此 $\chi_{1,\frac{1}{2},\frac{1}{2}}$ 的构造式只能是

$$\chi_{1,\frac{1}{2},\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{3}}\left[\sqrt{2}\chi_{11}(1,2)\beta(3)-\chi_{10}(1,2)\alpha(3)\right]$$

$$=\frac{1}{\sqrt{6}}[2\alpha(1)\alpha(2)\beta(3)-\alpha(1)\beta(2)\alpha(3)-\beta(1)\alpha(2)\alpha(3)]$$

同样的分析，有

$$\chi_{1,\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{6}}[\alpha(1)\beta(2)\beta(3)+\beta(1)\alpha(2)\beta(3)-2\beta(1)\beta(2)\alpha(3)]$$

4.49　对于两个自旋$\frac{1}{2}$粒子系的自旋单态 χ_{00}，$S_n\chi_{00}=0$ 及 $\langle\chi_{00}|\boldsymbol{\sigma}_i|\chi_{00}\rangle=0$

题 4.49　两个自旋$\frac{1}{2}$粒子系，自旋单态为

$$\chi_{00}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)]$$

证明 (1) χ_{00} 为总自旋在 $\boldsymbol{n}$ 方向投影 $S_n=\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{n}$ 的零本征值的本征态，即 $S_n\chi_{00}=0$；(2) $\boldsymbol{\sigma}_i$ $(i=1,2)$ 为粒子 1、2 的 Pauli 算符；$\langle\chi_{00}|\boldsymbol{\sigma}_i|\chi_{00}\rangle=0$

证明　由于(取 $\hbar=1$)

$$\sigma_x\alpha=\beta,\qquad \sigma_x\beta=\alpha;\qquad \sigma_y\alpha=\mathrm{i}\beta,\qquad \sigma_y\beta=-\mathrm{i}\alpha$$

$$S_x=\frac{1}{2}[\sigma_x(1)+\sigma_x(2)],\qquad S_y=\frac{1}{2}\left[\sigma_y(1)+\sigma_y(2)\right]$$

则

$$S_x\chi_{00}=\frac{1}{2\sqrt{2}}[\sigma_x(1)+\sigma_x(2)][\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)]$$

$$=\frac{1}{2\sqrt{2}}[\beta(1)\beta(2)+\alpha(1)\alpha(2)-\alpha(1)\alpha(2)-\beta(1)\beta(2)]=0$$

同样有

$$S_y\chi_{00}=0$$

因为

$$S_n=n_xS_x+n_yS_y+n_zS_z$$

立即有

$$S_n\chi_{00}=0$$

$$\sigma_x(1)|\chi_{00}\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\sigma_x(1)\left[|\alpha(1)\beta(2)\rangle-|\beta(1)\alpha(2)\rangle\right]=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\beta(1)\beta(2)\rangle-|\alpha(1)\alpha(2)\rangle\right]$$

$$\sigma_y(1)|\chi_{00}\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\sigma_y(1)\left[|\alpha(1)\beta(2)\rangle-|\beta(1)\alpha(2)\rangle\right]=\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\left[|\beta(1)\beta(2)\rangle+|\alpha(1)\alpha(2)\rangle\right]$$

$$\sigma_z(1)|\chi_{00}\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\alpha(1)\beta(2)\rangle+|\beta(1)\alpha(2)\rangle\right]$$

所以

$$\langle\chi_{00}|\boldsymbol{\sigma}_1|\chi_{00}\rangle=0$$

同样地，有

$$\langle\chi_{00}|\boldsymbol{\sigma}_2|\chi_{00}\rangle=0$$

4.50　$\langle\chi_{00}|(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{a})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{b})|\chi_{00}\rangle=-\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}$

题 4.50　自旋为 $\frac{1}{2}$ 的二粒子体系，处于自旋态 χ_{00}，设 $\boldsymbol{a}$ 与 $\boldsymbol{b}$ 是空间任意两个方向，粒子 1 的自旋沿 $\boldsymbol{a}$ 的分量 $\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{a}$ 与粒子 2 的自旋沿 $\boldsymbol{b}$ 的分量 $\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{b}$ 有确切的关联，证明

$$\langle\chi_{00}|(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{a})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{b})|\chi_{00}\rangle=-\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}$$

证明

$$S_b=(\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2)\cdot\boldsymbol{b}=\frac{\hbar}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)\cdot\boldsymbol{b}$$

有
$$S_b\left|\chi_{00}\right\rangle=\frac{\hbar}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{b}+\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{b})\left|\chi_{00}\right\rangle=0$$

故
$$\left\langle\chi_{00}\right|(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{a})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{b})\left|\chi_{00}\right\rangle=-\left\langle\chi_{00}\right|(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{a})(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{b})\left|\chi_{00}\right\rangle$$
$$=-\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}-\mathrm{i}\left\langle\chi_{00}\right|\boldsymbol{\sigma}_1\left|\chi_{00}\right\rangle\cdot(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})=-\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}$$

4.51　$L^2, L_z, L_\pm$ 与 $n_\pm, n_3$ 的对易子

题 4.51　设 $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{r}/r$ 为位置方向单位矢量，定义 $n_\pm=n_1\pm in_2$，计算 $L^2, L_z, L_\pm$ 与 $n_\pm, n_3$ 的对易关系，并证明

$$n_+\left|ll\right\rangle=-\sqrt{\frac{2(l+1)}{(2l+3)}}\left|l+1,l+1\right\rangle$$
$$n_3\left|ll\right\rangle=\left|l+1,l\right\rangle$$

式中，$\left|lm\right\rangle$ 为 L^2 与 L_z 的本征态.

解

$$\left[L_\alpha,n_\beta\right]=\left[L_\alpha,x_\beta\frac{1}{r}\right]=\left[L_\alpha,x_\beta\right]\frac{1}{r}+x_\beta\left[L_\alpha,\frac{1}{r}\right]$$
$$=\frac{\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}x_\gamma}{r}=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}n_\gamma$$
$$\left[L^2,n_\beta\right]=\left[L_\alpha L_\alpha,n_\beta\right]=\left[L_\alpha,n_\beta\right]L_\alpha+L_\alpha\left[L_\alpha,n_\beta\right]$$
$$=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}n_\gamma L_\alpha+\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}L_\alpha n_\gamma$$

因为
$$L_\alpha n_\gamma=n_\gamma L_\alpha+\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\gamma\theta}n_\theta,\qquad \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\alpha\gamma\theta}=-2\delta_{\beta\theta}$$

所以
$$\left[L^2,n_\beta\right]=2\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}n_\gamma L_\alpha+2\hbar^2n_\beta$$
$$\left[L^2,n_3\right]=2\mathrm{i}\hbar(n_1L_2-n_2L_1)+2\hbar^2n_3=\hbar(n_-L_+-n_+L_-)+2\hbar^2n_3$$
$$\left[L^2,n_+\right]=\left[L^2,n_1+\mathrm{i}n_2\right]=2\hbar(n_+L_3-n_3L_+)+2\hbar^2n_+$$
$$\left[L^2,n_-\right]=-2\hbar(n_-L_3-n_3L_-)+2\hbar^2n_-$$
$$\left[L_+,n_3\right]=\left[L_1+\mathrm{i}L_2,\ n_3\right]=-\hbar n_+$$
$$\left[L_+,n_+\right]=\left[L_1+\mathrm{i}L_2,n_1+\mathrm{i}n_2\right]=\mathrm{i}\left[L_1,n_2\right]+\mathrm{i}\left[L_2,n_1\right]=0$$
$$\left[L_+,n_-\right]=2\hbar n_3$$

$$[L_3,n_3]=0$$

$$[L_3,n_+]=\hbar n_+$$

$$[L_3,n_-]=-[L_3,n_+]^\dagger=-\hbar n_-$$

$$[L_-,n_+]=-[L_+,n_-]^\dagger=-2\hbar n_3$$

$$[L_-,n_-]=0$$

$$[L_-,n_3]=\hbar n_-$$

由于

$$L^2n_+|ll\rangle=\left[n_+L^2+2\hbar(n_+L_3-n_3L_+)+2\hbar^2n_+\right]|ll\rangle=(l+1)(l+2)\hbar^2n_+|ll\rangle$$

$$L_3n_+|ll\rangle=\left([L_3,n_+]+n_+L_3\right)|ll\rangle=(l+1)\hbar n_+|ll\rangle$$

即 $n_+|ll\rangle$ 也是 L^2,L_z 的量子数分为 $l+1$，$l+1$ 的共同本征态，即

$$n_+|ll\rangle=a_+|l+1,l+1\rangle$$

a_+ 由归一化条件确定. 由于

$$L_3n_3|ll\rangle=\left([L_3,n_3]+n_3L_3\right)|ll\rangle=l\hbar n_3|ll\rangle$$

即 $n_3|ll\rangle$ 的磁量子数仍为 l

$$L_+n_3|ll\rangle=\left([L_+,n_3]+n_3L_+\right)|ll\rangle=-\hbar n_+|ll\rangle=-a_+\hbar|l+1,l+1\rangle \tag{1}$$

由于 L_+ 为升算符，与 L_3 作用结果合起来可能有

$$n_3|ll\rangle=a_3|l+1,l\rangle \tag{2}$$

把式(2)代入式(1)，利用升算符作用的结果，则

$$\begin{aligned}-a_+\hbar|l+1,l+1\rangle&=L_+n_3|ll\rangle=a_3L_+|l+1,l\rangle\\&=a_3\hbar\sqrt{(l+1-l)(l+1+l+1)}\,|l+1,l+1\rangle\\&=a_3\hbar\sqrt{2l+2}\,|l+1,l+1\rangle\end{aligned}$$

即得

$$a_+=-a_3\sqrt{2(l+1)}$$

因为 $n^2=1=n_-n_++n_3^2$，$n_-=n_+^\dagger$，$n_3=n_3^\dagger$，所以

$$1=\langle ll|ll\rangle=\langle ll|n_-n_+|ll\rangle+\langle ll|n_3n_3|ll\rangle=|a_+|^2+|a_3|^2=[2(l+1)+1]|a_3|^2$$

在取定 $|lm\rangle$ 的位相下，a_+，a_3 都需要是实数，于是

$$a_3=\frac{1}{\sqrt{2l+3}},\qquad a_+=-\sqrt{\frac{2(l+1)}{2l+3}}$$

即

$$n_3|ll\rangle=\frac{1}{\sqrt{2l+3}}|l+1,l\rangle$$

$$n_+|ll\rangle=-\sqrt{\frac{2(l+1)}{2l+3}}|l+1,l+1\rangle$$

类似地有

$$n_-|l,-l\rangle=\sqrt{\frac{2(l+1)}{2l+3}}|l+1,-(l+1)\rangle$$

$$n_3|l,-l\rangle=\frac{1}{\sqrt{2l+3}}|l+1,-l\rangle$$

$$n_3|l,m\rangle=a_{lm}|l+1,m\rangle+a_{l-1,m}|l-1,m\rangle$$

$$a_{lm}=\sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}$$

4.52 Pauli 矩阵的一些性质

题 4.52 设有四个 2×2 Hermite 矩阵 I，σ_1、σ_2、σ_3，其中 I 是单位矩阵，其他三个满足关系 $\sigma_i\sigma_j+\sigma_j\sigma_i=2I\delta_{ij}$. 不用任何具体表示，证明下列性质：(1) $\mathrm{Tr}(\sigma_i)=0$，(2) σ_i 本征值为 ±1，$\det\sigma_i=-1$. (3) 四个矩阵线性无关，因此，任何 2×2 矩阵都可以用它们表示出来. (4) 从(3)知道 $M=mI+\sum_{i=1}^{3}m_i\sigma_i$，其中 M 是任意 2×2 矩阵. 导出 m_i 的表达式.

证明 (1) 依题意得 $\sigma_i\sigma_j=-\sigma_j\sigma_i\ (i\neq j)$; $\sigma_i^2=I$，所以对于 $i\neq j$，有

$$\sigma_i=-\sigma_j\sigma_i\sigma_j$$

$$\mathrm{Tr}\sigma_i=-\mathrm{Tr}(\sigma_j\sigma_i\sigma_j)=-\mathrm{Tr}(\sigma_j\sigma_j\sigma_i)=-\mathrm{Tr}(\sigma_i)$$

所以

$$\mathrm{Tr}(\sigma_i)=0$$

(2) 因为 $\sigma_j^2=1$，故本征值满足 $\lambda_m^2=1$. 所以 $\lambda_m=\pm1$，由 $\mathrm{Tr}\sigma_i=0$ 知 $\lambda_2=-1$，$\lambda_1=1$ 于是

$$\det\sigma_i=\lambda_1\lambda_2=-1$$

(3) 若 $0=m_0I+\sum_i^3 m_i\sigma_i$ 成立，依次用 I，σ_i 乘等式两边并取迹，得 $m_0=0,\ m_i=0$. 故 I，σ_i 线性无关，任何 2×2 矩阵可用这四个矩阵表示出来.

(4) 设 $M=mI+\sum_{i=1}^{3}m_i\sigma_i$，依次用 I，σ_i 乘等式两边并取迹，有

$$m_0=\frac{1}{2}\mathrm{Tr}M,\qquad m_i=\frac{1}{2}\mathrm{Tr}(\sigma_iM),\qquad i=1,2,3$$

4.53 $S=1$ 的自旋算符的代数结果

题 4.53 自旋为 1 的三个矩阵算符满足

$$S_xS_y+S_yS_x=\mathrm{i}S_z$$

及其轮换式. 证明 $S_z^3=S_z$，$\left(S_x\pm \mathrm{i}S_y\right)^3=0$.

证明　取自旋为 1 的角动量算子在 S，S_z 的对角表象中矩阵表示

$$S_x=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix},\qquad S_y=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}&0\\ \mathrm{i}&0&-\mathrm{i}\\0&\mathrm{i}&0\end{pmatrix},\qquad S_z=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$$

所以

$$S_z^3=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}^3=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}=S_z$$

$$\left(S_x+\mathrm{i}S_y\right)^3=\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&2&0\\0&0&2\\0&0&0\end{pmatrix}\right]^3=0$$

$$\left(S_x-\mathrm{i}S_y\right)^3=\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&0&0\\2&0&0\\0&2&0\end{pmatrix}\right]^3=0$$

4.54　角动量矩阵的本征值

题 4.54　三个矩阵 M_z，M_y，M_x，每个均为 256 行和列的方阵，它们服从对易关系 $\left[M_x,M_y\right]=iM_z$，($x,y,z$ 轮换). M_z 的本征值为 ± 2 各一个，$\pm 3/2$ 各 8 个，± 1 各 28 个，$\pm 1/2$ 各 56 个，以及 0 有 70 个. 给出 $M^2\equiv M_x^2+M_y^2+M_z^2$ 的 256 个本征值.

解　M^2 与 M_x 对易，因此可取它们的共同本征态 $|M,M_x\rangle$，有

$$M^2|M,M_x\rangle=m(m+1)|M,M_x\rangle$$

$$M_x|M,M_x\rangle=m_x|M,M_x\rangle$$

属于同一个 m 的 m_x 取值为 $+m,m-1,\cdots,-m$.

m:　　2　　3/2　　1　　1/2　　0

$$m_x:\left.\begin{matrix}\pm 2\\ \pm 1\\ 0\end{matrix}\right\}\text{各 1 个、}\left.\begin{matrix}\pm 3/2\\ \pm 1/2\end{matrix}\right\}\text{各 8 个、}\left.\begin{matrix}\pm 1\\ 0\end{matrix}\right\}\text{各 27 个、}\pm 1/2\text{各 48 个、}0\text{各 42 个}$$

m 对应多重数为 $2m+1$，因此 M^2 本征值为

$$M^2=\frac{15}{4},\qquad 32\text{ 个}$$

$$M^2=2,\qquad 81\text{ 个}$$

$$M^2=\frac{3}{4},\qquad 96\text{ 个}$$

$$M^2=0, \qquad 42\text{个}$$
$$M^2=6, \qquad 5\text{个}$$

共256个.

4.55　σ_z表象中σ_x,σ_y的本征态

题 4.55　若$\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z$为Pauli矩阵，求：(1) 在$\sigma_z$表象中，$\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z$的归一化本征态. (2) 在$\sigma_x$表象中，$\sigma_y,\sigma_z$的本征态和本征值.

解　(1) 在σ_z表象中，$\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z$的表示为

$$\sigma_x=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}, \qquad \sigma_y=\begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{pmatrix}, \qquad \sigma_z=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

设本征态为$\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}$.

由相应算符的久期方程可得它们的本征值皆为±1，代入各自的本征方程可得

$$\sigma_x\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}=\pm\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}\Rightarrow\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}=\begin{cases}\begin{pmatrix}1/\sqrt{2}\\ 1/\sqrt{2}\end{pmatrix}, & \lambda=1\\ \begin{pmatrix}1/\sqrt{2}\\ -1/\sqrt{2}\end{pmatrix}, & \lambda=-1\end{cases}$$

$$\sigma_y\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}=\pm\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}\Rightarrow\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}=\begin{cases}\begin{pmatrix}1/\sqrt{2}\\ \mathrm{i}/\sqrt{2}\end{pmatrix}, & \lambda=1\\ \begin{pmatrix}1/\sqrt{2}\\ -\mathrm{i}/\sqrt{2}\end{pmatrix}, & \lambda=-1\end{cases}$$

$$\sigma_z\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}=\pm\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}\Rightarrow\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}=\begin{cases}\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}, & \lambda=1\\ \begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix}, & \lambda=-1\end{cases}$$

(2) 因为σ_x在σ_z表象和σ_x表象中的本征态分别为

$$\psi_1=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ 1\end{pmatrix}, \qquad \psi_2=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -1\end{pmatrix}$$

和

$$\psi_1'=\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}, \qquad \psi_2'=\begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix}$$

故可求出由σ_z表象向σ_x表象的变换矩阵

$$S_{\alpha k}=(\psi'_\alpha,\psi_k)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1&1\\1&-1\end{pmatrix},\qquad \alpha,k=1,2$$

由此可得σ_y的本征态为

$$\psi_{y+}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1&1\\1&-1\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\\mathrm{i}\end{pmatrix}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1+\mathrm{i}\\1-\mathrm{i}\end{pmatrix}$$

$$\psi_{y-}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1&1\\1&-1\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-\mathrm{i}\end{pmatrix}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1-\mathrm{i}\\1+\mathrm{i}\end{pmatrix}$$

因为幺正变换不改变本征值，故本征值仍为±1.

同理可得σ_z的本征态为

$$\psi_{z+}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix},\qquad \lambda=1$$

$$\psi_{z-}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix},\qquad \lambda=-1$$

4.56　在态$\psi=K\left(x+y+2z\right)\mathrm{e}^{-ar}$中，总角动量及$L_z$的期望值

题 4.56　有一无自旋的粒子，其波函数为

$$\psi=K\left(x+y+2z\right)\mathrm{e}^{-ar}$$

式中，$r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$且K，a是实常数. (1) 粒子的总角动量是多少？(2) 角动量的z分量的期望值是多少？(3) 若角动量的z分量L_z被测量，问测得$L_z=+\hbar$的概率为多少？(4) 发现粒子在θ,ϕ方向上的$\mathrm{d}\Omega$立体角内的概率是多少？其中θ,ϕ就是通常球坐标中的角度.

你会发现以下写出的头几项球谐函数的表达式是有用的

$$Y_{00}=\sqrt{\frac{1}{4\pi}},\qquad Y_{1\pm1}=\pm\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\phi}$$

$$Y_{10}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta\qquad Y_{2\pm1}=\pm\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\phi}$$

解　用球坐标将波函数写出

$$\psi=Kr(\cos\phi\sin\theta+\sin\phi\sin\theta+2\cos\theta)\mathrm{e}^{-ar}$$

那么，角度部分的波函数为

$$\psi(\theta,\phi)=K'(\cos\phi\sin\theta+\sin\phi\sin\theta+2\cos\theta)$$

归一化之后有

$$\int_0^\pi\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\phi\sin\theta K'^2(\cos\phi\sin\theta+\sin\phi\sin\theta+2\cos\theta)^2=1$$

$$\cos\phi=\frac{1}{2}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}),\qquad \sin\phi=\frac{1}{2\mathrm{i}}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi})$$

从而有

$$\psi(\theta,\phi)=K'\left[\frac{1}{2}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi})\sin\theta+\frac{1}{2\mathrm{i}}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi})\sin\theta+\cos2\theta\right]$$

$$\psi(\theta,\phi)=K'\left[-\frac{1}{2}(1-\mathrm{i})\sqrt{\frac{8\pi}{3}}Y_{11}+\frac{1}{2}(1+\mathrm{i})\sqrt{\frac{8\pi}{3}}Y_{1-1}+2\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{10}\right]$$

代入归一化条件，注意到Y_{lm}的正交归一性，从而有

$$K'^2\left(\frac{1}{2}\cdot\frac{8\pi}{3}+\frac{1}{2}\cdot\frac{8\pi}{3}+4\cdot\frac{4\pi}{3}\right)=1,\qquad 即\ K'=\sqrt{\frac{1}{8\pi}}$$

$$\psi(\theta,\phi)=\sqrt{\frac{1}{8\pi}}\left[-\frac{1}{2}(1-\mathrm{i})\sqrt{\frac{8\pi}{3}}Y_{11}+\frac{1}{2}(1+\mathrm{i})\sqrt{\frac{8\pi}{3}}Y_{1-1}+2\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{10}\right]$$

(1) $\sqrt{\langle L^2\rangle}=\sqrt{1\cdot(1+1)}\hbar=\sqrt{2}\hbar$.

(2) $\langle L_z\rangle=\dfrac{1}{8\pi}\left[\dfrac{1}{2}\cdot\dfrac{8\pi}{3}(+\hbar)+\dfrac{1}{2}\cdot\dfrac{8\pi}{3}(-\hbar)\right]=0$.

(3) $P(发现\ L_z=+\hbar)=\left|\langle L_z=+\hbar|\psi(\theta\phi)\rangle\right|^2=\dfrac{1}{8\pi}\cdot\dfrac{1}{2}\cdot\dfrac{8\pi}{3}=\dfrac{1}{6}$.

(4) $P(在\ \theta,\phi\ 方向上\ \mathrm{d}\Omega\ 中)=\dfrac{1}{8\pi}[\sin\theta(\sin\phi+\cos\phi)+2\cos\theta]^2\,\mathrm{d}\Omega$

4.57　对 $L=2\hbar$, $S=1\hbar$ 的粒子，$H=A\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$ 的能级及简并度

题 4.57　一个处于中心势的粒子具有轨道角动量 $L=2\hbar$ 和自旋 $S=1\hbar$．求和形如 $H_{so}=A\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$ 的自旋-轨道相互作用项相关的能级和简并度，这里 A 是个常数.

解　本题可选$\{H,J^2,J_z,L^2,S^2\}$作为力学量完全集，角度和自旋部分的波函数可取为ϕ_{jm_jls}，

$$J^2\phi_{jm_jls}=\hbar^2j(j+1)\phi_{jm_jls},\ L^2\phi_{jm_jls}=\hbar^2l(l+1)\phi_{jm_jls}$$

$$S^2\phi_{jm_jls}=\hbar^2s(s+1)\phi_{jm_jls},\ J_z\phi_{jm_jls}=\hbar m_j\phi_{jm_jls}$$

注意到

$$H_{so}=A\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}=\frac{1}{2}A(J^2-L^2-S^2)$$

可知相应的能级及简并度如下

$$E_{so}=\frac{\hbar^2}{2}A\left[j(j+1)-2(2+1)-1(1+1)\right]$$

$$=\begin{cases}2A\hbar^2, & j=3,\\ -A\hbar^2, & j=2,\\ -3A\hbar^2, & j=1,\end{cases}$$

$$d = 2j+1 = \begin{cases} 7, & j=3. \\ 5, & j=2. \\ 3, & j=1. \end{cases}$$

4.58　电子在 $\psi = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\left(e^{i\varphi}\sin\theta + \cos\theta\right)g(r)$ 态中，L_z 的可能值及概率

题 4.58　假定一电子状态由波函数

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}(e^{i\phi}\sin\theta + \cos\theta)g(r)$$

描述. 其中 $\int_0^\infty |g(r)|^2 r^2 dr = 1$，且 ϕ, θ 分别是方位角和极角. (1) 处在该态电子的轨道角动量 z 分量 L_z 的可能测量结果是什么？(2) 得到(1)中每个可能结果的概率是多少？(3) L_z 的期望值是多少？

解　(1) 由于

$$\int_0^\infty |g(r)|^2 r^2 dr = 1$$

得到

$$\int |\psi|^2 dr = 1$$

注意到

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta, \qquad Y_{1\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\phi}$$

因此

$$\psi = \sqrt{\frac{1}{3}}(-\sqrt{2}Y_{1+1} + Y_{10})g(r)$$

由此可知，可能测得 L_z 值为：$+\hbar$, 0.

(2) 测得 $L_z = +\hbar$ 的概率为 $\frac{2}{3}$；测得 $L_z = 0$ 的概率为 $\frac{1}{3}$.

(3) $\int \psi^* L_z \psi r^2 \sin\theta d\theta d\phi dr$

$$= \int\left[\sqrt{\frac{1}{3}}(-\sqrt{2}Y_{1-1} + Y_{1,0})\right]L_z\left[\sqrt{\frac{1}{3}}(-\sqrt{2}Y_{1+1} + Y_{1,0})\right]r^2|g(r)|^2 dr \sin\theta d\theta d\phi = \frac{2}{3}\hbar$$

4.59　$\langle jm|U(\beta, y)|jm'\rangle$

题 4.59　$U(\beta, y)$ 表示绕 y 轴转 β 角的一个转动算符. 证明矩阵元

$$\langle jm|U(\beta, y)|jm'\rangle, \qquad -j \leqslant m, m' \leqslant j$$

是变量 $\sin\frac{\beta}{2}$ 和 $\cos\frac{\beta}{2}$ 的 $2j$ 次齐次多项式. $|jm\rangle$ 是角动量平方及角动量 z 分量的本征态

$$J^2|jm\rangle = j(j+1)\hbar^2|jm\rangle$$

$$J_z|jm\rangle = m\hbar|jm\rangle$$

证明　用数学归纳法证明.

当 $j=0$ 时，结论显然正确.

当 $j=\frac{1}{2}$ 时，$J_y=\frac{\hbar}{2}\sigma_y=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0, & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i}, & 0\end{pmatrix}$，于是

$$U(\beta,-y)\equiv\exp\left(-\mathrm{i}\beta J_y/\hbar\right)=\exp\left(-\mathrm{i}\frac{\beta}{2}\sigma_y\right)$$

$$=\cos\frac{\beta}{2}-\mathrm{i}\sin\frac{\beta}{2}\sigma_y=\cos\frac{\beta}{2}-2\mathrm{i}\frac{1}{\hbar}\sin\frac{\beta}{2}J_y$$

所以

$$\left\langle\frac{1}{2},m\middle|U\middle|\frac{1}{2},m'\right\rangle=\left\langle\frac{1}{2},m\middle|\exp\left(-\mathrm{i}\beta J_y/\hbar\right)\middle|\frac{1}{2},m'\right\rangle$$

$$=\delta_{mm'}\cos\frac{\beta}{2}-\frac{2\mathrm{i}}{\hbar}\left\langle\frac{1}{2},m\middle|J_y\middle|\frac{1}{2},m'\right\rangle\sin\frac{\beta}{2}$$

注意到第二项的 J_y 矩阵元是不含 β 的(是虚常数)，故 $\left\langle\frac{1}{2},m\middle|U\middle|\frac{1}{2},m'\right\rangle$ 是 $\cos\frac{\beta}{2}$ 和 $\sin\frac{\beta}{2}$ 的一次齐次式，结论对此特例正确.

假定角动量为 j 时结论正确　即假定有

$$\left\langle jm|U|jm'\right\rangle=\left\langle jm\middle|\exp\left(-\mathrm{i}\beta J_y/\hbar\right)\middle|jm\right\rangle=\sum_{n=0}^{2j}A_n\cdot\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2j-n}\left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^n$$

$$A_n=A_n(j,m,m')$$

求证角动量为 $j+\frac{1}{2}$ 时结论仍正确.

设 $J'=J+J_1$，J 量子数为 j，J_1 量子数为 $\frac{1}{2}$. 将耦合表象中的 $|J,m\rangle=\left|j+\frac{1}{2},m\right\rangle$ 用无耦合表展开

$$\left|j+\frac{1}{2},m\right\rangle=C_1\left|j,m+\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle+C_2\left|j,m-\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$$

式中，C_1,C_2 是(与 β 无关的) C-G 系数. 将此展式代入

$$\left\langle j+\frac{1}{2},m\middle|\exp\left[-\mathrm{i}\beta\left(J_y+J_{1y}\right)/\hbar\right]\middle|j+\frac{1}{2},m'\right\rangle$$

中，可知归结为计算如下几个矩阵元

$$\left\langle\frac{1}{2},\mp\frac{1}{2},j,m\pm\frac{1}{2}\middle|\exp\left[-\mathrm{i}\beta\left(J_y+J_{1y}\right)/\hbar\right]\middle|j,m'\pm\frac{1}{2},\frac{1}{2},\mp\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\left\langle\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2},j,m\mp\frac{1}{2}\middle|\exp\left[-\mathrm{i}\beta\left(J_y+J_{1y}\right)/\hbar\right]\middle|j,m'\mp\frac{1}{2},\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2}\right\rangle$$

比如

$$\left\langle\frac{1}{2},-\frac{1}{2},j,m+\frac{1}{2}\right|\exp\left[-\mathrm{i}\beta\left(J_y+J_{1y}\right)/\hbar\right]\left|j,m'+\frac{1}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\cdot\left\langle\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right|\exp\left(-\mathrm{i}\beta J_{1y}/\hbar\right)\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\left\langle j,m+\frac{1}{2}\right|\exp\left(-\mathrm{i}\beta J_y/\hbar\right)\left|j,m'+\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$=\left(a_1\cos\frac{\beta}{2}+b_1\sin\frac{\beta}{2}\right)\sum_{n=0}^{2j}A_n\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{-2j-n}\left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^n$$

$$=\sum_{l=0}^{2(j+\frac{1}{2})}B_n(j+\frac{1}{2},m,m')\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2(j+\frac{1}{2})-1}\left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^l$$

于是结论对 $j+\dfrac{1}{2}$ 仍正确. 也即矩阵元

$$\left\langle jm\right|U(\beta,y)\left|jm'\right\rangle=\left\langle jm\right|\exp\left(-\mathrm{i}\beta J_y/\hbar\right)\left|jm'\right\rangle$$

是关于 $\cos\dfrac{\beta}{2}$ 和 $\sin\dfrac{\beta}{2}$ 的 $2j$ 次齐次多项式.

4.60　两个自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子相互作用 $f=a+b\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$ 在耦合与非耦合表象中的矩阵表示

题 4.60　一个算符 f 描述两个自旋 $\dfrac{1}{2}$ 粒子间的相互作用具有如下形式

$$f=a+b\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$$

式中, a 和 b 是常数, $\boldsymbol{\sigma}_1$ 和 $\boldsymbol{\sigma}_2$ 是 Pauli 矩阵. 总自旋角动量 $\boldsymbol{J}$ 为 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{j}_1+\boldsymbol{j}_2=\dfrac{\hbar}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)$. (1) 证明 f , J^2 和 J_z 可同时测量. (2) 推导出在基 $|JMj_1j_2\rangle$ 下 f 的矩阵表示(标出矩阵的行和列). (3) 推导出在基 $|j_1j_2m_1m_2\rangle$ 下 f 的矩阵表示.

解　(1) 所谓 f , J^2 和 J_z 可同时测量, 就是要求它们之间彼此对易. J^2 与 J_z 是对易的, 而

$$\left[f,J^2\right]=\left[a,J^2\right]+\left[b\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2,J^2\right]=b\left[\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2,J^2\right]$$

利用 $\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2=\dfrac{2J^2}{\hbar^2}-3$, 得 $\left[f,J^2\right]=0$. 又因为 $\left[J^2,J_z\right]=0$, 所以

$$\left[f,J_z\right]=\left[a,J_z\right]+b\left[\frac{2J^2}{\hbar^2}-3,J_z\right]=0$$

因此 f 、 J^2 、 J_z 之间相互对易, 可同时测量.

(2) 在 $|JMj_1j_2\rangle$ 基下

$$\langle JMj_1j_2|f|J'M'j_1j_2\rangle=a\delta_{JJ'}\delta_{MM'}+b\langle JMj_1j_2|\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2|J'M'j_1j_2\rangle$$

$$=a\delta_{JJ'}\delta_{MM'}+b\left(\frac{2}{\hbar^2}J'(J'+1)\hbar^2-3\right)\cdot\delta_{JJ'}\delta_{MM'}$$

$$=\left[a+2bJ(J+1)-3b\right]\delta_{JJ'}\delta_{MM'}$$

式中，JM 为行指标，$J'M'$ 为列指标.

(3) 用 χ_0 和 χ_{1m} 分别表示 $J=0$ 和 $J=1$，$J_z=M$ 的态. 因 $j_1=j_2=\dfrac{1}{2}$，可用简写记号 $|m_1m_2\rangle$ 表示 $|j_1j_2m_1m_2\rangle$ 态. 易知

$$\begin{cases}\chi_0=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\left\{\left|\dfrac{1}{2},-\dfrac{1}{2}\right\rangle-\left|-\dfrac{1}{2},\dfrac{1}{2}\right\rangle\right\}\\[2ex] \chi_{10}=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\left\{\left|\dfrac{1}{2},-\dfrac{1}{2}\right\rangle+\left|-\dfrac{1}{2},\dfrac{1}{2}\right\rangle\right\}\\[2ex] \chi_{1\pm1}=\left|\pm\dfrac{1}{2},\pm\dfrac{1}{2}\right\rangle\end{cases}$$

因此

$$\begin{cases}\left|\pm\dfrac{1}{2},\pm\dfrac{1}{2}\right\rangle=\chi_{1\pm1}\\[2ex] \left|\dfrac{1}{2},-\dfrac{1}{2}\right\rangle=\dfrac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{00}+\chi_{10})\\[2ex] \left|-\dfrac{1}{2},\dfrac{1}{2}\right\rangle=\dfrac{1}{\sqrt{2}}(-\chi_{00}+\chi_{10})\end{cases}$$

将上述表达式代入矩阵元 $\langle m_1m_2|fm'_1m'_2\rangle$ 中，并注意 b 中结果，可得在基 $|j_1j_2m_1m_2\rangle$ 下 f 的矩阵形式如下.

m_1m_2 \ $m'_1m'_2$	$\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$, $-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$, $-\frac{1}{2}$
$\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$	$a+b$	0	0	0
$\frac{1}{2}$, $-\frac{1}{2}$	0	$a-b$	$2b$	0
$-\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$	0	$2b$	$a-b$	0
$-\frac{1}{2}$, $-\frac{1}{2}$	0	0	0	$a+b$

4.61　两粒子系 L_1^2、L_2^2 及 J^2 的可能值

题 4.61　考虑坐标空间中的如下两粒子波函数

$$\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=f(r_1^2)g(r_2^2)\left[\alpha(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r}_1)(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r}_2)+\beta(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r}_1)\cdot(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r}_2)+\gamma(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})(\boldsymbol{r}_1\cdot\boldsymbol{r}_2)\right]$$

$\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 是任意的常矢量，f 和 g 是任意函数，α,β 和 γ 是常数. (1) 每个粒子角动量平方(L_1^2

和 L_2^2)的本征值是多少? (2) 适当选取 α,β 和 γ, $\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)$ 也能构成总角动量平方 $J^2=(\boldsymbol{L}_1+\boldsymbol{L}_2)^2$ 的本征函数. 总角动量平方的可能值是多少? 对每个状态 α, β 和 γ 的适当值又是多少?

解 注意到

$$\nabla f(r)=f'(r)\frac{\boldsymbol{r}}{r},\qquad \nabla(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r})=\boldsymbol{a}$$

$$(\boldsymbol{r}\times\nabla)\cdot(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{a})=-2\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r},\qquad \left[\boldsymbol{L},r^2\right]=0$$

则有

(1)
$$\begin{aligned}L_1^2\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)&=-\hbar^2(\boldsymbol{r}_1\times\nabla_1)\cdot(\boldsymbol{r}_1\times\nabla_1)f(r_1^2)g(r_2^2)\\&\quad\cdot\left[\alpha(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r}_1)(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r}_2)+\beta(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r}_2)(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r}_2)+\gamma(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})(\boldsymbol{r}_1\cdot\boldsymbol{r}_2)\nabla_1\right]\\&=-\hbar^2f(r_1^2)g(r_2^2)(\boldsymbol{r}_1\times\nabla_1)\cdot(\boldsymbol{r}_1\times\nabla_1)\\&\quad\cdot\left[\alpha(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r}_1)(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r}_2)+\beta(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r}_1)(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r}_2)+\gamma(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})(\boldsymbol{r}_1\cdot\boldsymbol{r}_2)\right]\\&=-\hbar^2f(r_1^2)g(r_1^2)(\boldsymbol{r}_1\times\nabla_1)\\&\quad\cdot\left[\alpha(\boldsymbol{r}_1\times\boldsymbol{a})(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r}_2)+\beta(\boldsymbol{r}_1\times\boldsymbol{b})(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r}_2)+\gamma(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})(\boldsymbol{r}_1\times\boldsymbol{r}_2)\right]\\&=2\hbar^2f(r_1^2)g(r_2^2)\\&\quad\cdot\left[\alpha(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r}_1)(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r}_2)+\beta(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r}_1)(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r}_2)+\gamma(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})(\boldsymbol{r}_1\cdot\boldsymbol{r}_2)\right]\\&=1(1+1)\hbar^2\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\end{aligned}$$

类似地，有

$$L_2^2\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=1(1+1)\hbar^2\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)$$

因此，L_1^2 和 L_2^2 的本征值都是 $2\hbar^2$，或者说两个粒子的轨道角动量量子数都等于 1.

(2)
$$\begin{aligned}\boldsymbol{L}_1\cdot\boldsymbol{L}_2\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)&=-\hbar^2(\boldsymbol{r}_1\times\nabla_1)\cdot(\boldsymbol{r}_2\times\nabla_2)f(r_1^2)g(r_2^2)\\&\quad\cdot\left[\alpha(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r}_1)(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r}_2)+\beta(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r}_1)(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r}_2)+\gamma(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})(\boldsymbol{r}_1\cdot\boldsymbol{r}_2)\right]\\&=-\hbar^2f(r_1^2)g(r_2^2)(\boldsymbol{r}_1\times\nabla_1)\cdot(\boldsymbol{r}_2\times\nabla_2)\\&\quad\cdot\left[\alpha(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r}_1)(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r}_2)+\beta(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r}_1)(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r}_2)+\gamma(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})(\boldsymbol{r}_1\cdot\boldsymbol{r}_2)\right]\\&=-\hbar^2f(r_1^2)g(r_2^2)(\boldsymbol{r}_1\times\nabla_1)\\&\quad\cdot\left[\alpha(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r}_1)(\boldsymbol{r}_2\times\boldsymbol{b})+\beta(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r}_1)(\boldsymbol{r}_2\times\boldsymbol{a})+\gamma(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})(\boldsymbol{r}_2\times\boldsymbol{r}_1)\right]\\&=-\hbar^2f(r_1^2)g(r_2^2)\\&\quad\cdot\left[\alpha(\boldsymbol{r}_1\times\boldsymbol{a})(\boldsymbol{r}_2\times\boldsymbol{b})+\beta(\boldsymbol{r}_1\times\boldsymbol{b})(\boldsymbol{r}_2\times\boldsymbol{a})+\gamma(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})(2\boldsymbol{r}_1\cdot\boldsymbol{r}_2)\right]\\&=-\hbar^2f(r_1^2)g(r_2^2)\\&\quad\cdot\left[-\beta(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r}_1)(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r}_2)-\alpha(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r}_1)(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r}_2)+(\alpha+\beta+2\gamma)(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})(\boldsymbol{r}_1\cdot\boldsymbol{r}_2)\right]\end{aligned}$$

因此，$\psi(r_1,r_2)$是L_1，L_2的本征函数(从而是$J^2=L_1^2+L_2^2+2L_1\cdot L_2$的本征函数)，其充分必要条件为$-\beta=\lambda\alpha,-\alpha=\lambda\beta,(\alpha+\beta+2\gamma)=\lambda\gamma$. 上述条件允许有三组解

$$\lambda=-1,\qquad \alpha=\beta=-\frac{3}{2}\gamma;$$

$$\lambda=+1,\qquad \alpha=-\beta,\gamma=0;$$

$$\lambda=2,\qquad \alpha=\beta=0.$$

于是，总角动量平方J^2的可能值及其相应的α,β,γ参数值为

$$J^2=2\hbar^2+2\hbar^2-2\hbar^2\lambda=\begin{cases}2(2+1)\hbar^2, & \alpha=\beta=-\frac{3}{2}\gamma\\ 1(1+1)\hbar^2, & \alpha=-\beta,\gamma=0\\ 0, & \alpha=\beta=0\end{cases}$$

4.62　在给定的空间态中，L^2,L_z的值

题 4.62　一粒子的某一量子力学态，在直角坐标x,y,z中由归化波函数

$$\psi(x,y,z)=\frac{\alpha^{5/2}}{\sqrt{\pi}}Z\exp\left[-\alpha(x^2+y^2+z^2)^{1/2}\right]$$

描述. 证明系统处在一个具有确定角动量的态上. 并给出该态相应的L^2和L_z的值.

解　转换到球坐标中

$$x=r\sin\theta\cos\varphi,\qquad y=r\sin\theta\sin\varphi,\qquad z=r\cos\theta$$

$$\psi(\gamma,\theta,\varphi)=\frac{\alpha^{5/2}}{\sqrt{\pi}}r\cos\theta e^{-\alpha r}=f(r)Y_{10}$$

由此可见该粒子处在一具有确定角动量的态上，该态$L^2=l(l+1)\hbar^2$，$L_z=0$.

4.63　自由碳原子的电子组态

题 4.63　一个自由碳原子有 4 个成对 s 态电子，2 个 p 态电子. (1) 考虑到 Pauli 不相容原理，这个组态共有多少种状态？(2) 在LS耦合情形，哪些量子数为好量子数？对两个 p 波电子组态给出它们的值. (3) 对(2)中的态的简并度求和，证明结果与(1)中得到的相同.

解　(1) 每个电子可以占据$(2l+1)(2s+1)=3\times2=6$个状态之一，但不能有两个电子处于同一状态，故共有$C_6^2=15$种状态.

(2) 好量子数为L^2,S^2,J^2,J_z. 由于是LS耦合，总自旋量子数可取$S=0,1$；总轨道量子数可取$L=0,1,2$. 考虑到交换对称性，单态$S=0$，L应为偶数，所以$L=0,2$分别对应于${}^1S_0$，${}^1D_2$. 三重态$S=1$，L应为奇数，所以$L=1$，即${}^3P_{0,1,2}$.

(3) 简并度$=2J+1$，中$J=0,2,0,1,2$，所以简并度总和$=1+5+1+3+5=15$.

4.64　从带负电的全同的 $S=1$ 的两粒子代替氦原子中电子求其基态简并

题 4.64　实际氦原子的基态当然是非简并的. 但是，考虑一假想的氦原子，其中两个带负电. 全同的、自旋为 1 的两粒子代替了原来的两个电子. 对这种假想的氦原子，问其基态的简并度是多少？给出你的理由(忽略与自旋有关的作用).

解　这两个新的粒子为玻色子，因而波函数应该是对称的.

基态时显然两个粒子应占有 1s 轨道，因而空间波函数是对称的. 这样就要求自旋波函数也是对称的. 因 $S_1=1, S_2=1$ ，故合成的 S 有三种可能：

$S=2$ ，自旋波函数对称，5 重简并；

$S=1$ ，自旋波函数反对称，3 重简并；

$S=0$ ，自旋波函数对称，1 重简并.

因略去与自旋有关的作用，故基态 6 重简并.

4.65　电子自旋态的测量

题 4.65　测量一个电子(处于自由空间)自旋的 z 分量，发现是 $\frac{\hbar}{2}$. (1) 接着测量自旋的 x 分量，可能得到什么结果？(2) 得到这些结果的概率是多少？(3) 如果测量自旋方向的轴与 z 轴成 θ 角，各种可能值的概率多少？(4) 在(3)中自旋测量期待值是多少？

解　(1) 在 σ_z 表象中，自旋波函数为 $\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$，而 σ_x 的本征波函数为 $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$，$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$. 相应本征值为+1，−1. 将 $\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ 对此两态展开即知测量 S_x 可能得到 $\pm\frac{\hbar}{2}$. 测得的平均值

$$(1\ 0)S_x\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=0$$

(2) 测得 $\pm\frac{\hbar}{2}$ 的概率分别为 P_+, P_-

$$P_+=\left|\frac{1}{\sqrt{2}}(1,1)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\right|^2=\frac{1}{2},\qquad P_-=\left|\frac{1}{\sqrt{2}}(1,-1)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\right|^2=\frac{1}{2}$$

(3) 设自旋轴为 $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{n}(\theta,\varphi)=(\sin\theta\cos\varphi,\sin\theta\sin\varphi,\cos\theta)$ ，则 $\boldsymbol{s}$ 沿 $\boldsymbol{n}$ 投影 $s_n=\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{n}$ 的本征态为

$$\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}\\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi/2}\end{pmatrix},\qquad \begin{pmatrix}-\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}\\ \cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi/2}\end{pmatrix}$$

分别相应于本征值 $\hbar/2, -\hbar/2$. 测得 $\pm\hbar/2$ 本征值的概率分别为

$$\cos^2\frac{\theta}{2},\qquad \sin^2\frac{\theta}{2}.$$

(4) 期待值$=P_+\left(+\frac{\hbar}{2}\right)-P_-\left(-\frac{\hbar}{2}\right)=\frac{\hbar}{2}\cos\theta$.

4.66 算符 AS_y+BS_x 的本征值、本征态

题 4.66 (1) 考虑自旋为 $\frac{1}{2}$ 的系统. 求出算符 AS_y+BS_x 的本征值及归一化的本征函数. 其中 S_y,S_x 是角动量算符，且 A、B 是实常数. (2) 假定此系统正在以上算符的一个本征态中. 求测量 S_y 得结果 $\frac{\hbar}{2}$ 的概率. Pauli 矩阵为

$$\sigma_x=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\qquad \sigma_y=\begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{pmatrix},\qquad \sigma_z=\begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}.$$

解 (1) 令 $T=AS_y+BS_x=A\frac{1}{2}\hbar\sigma_y+B\frac{1}{2}\hbar\sigma_z$，有 $T^2=\frac{1}{4}\hbar^2(A^2+B^2+AB[\sigma_y,\sigma_z])=\frac{1}{4}\hbar^2(A^2+B^2)$，其中已用到 $[\sigma_i,\sigma_j]=2\delta_{ij}$，因而 T 的两个本征值为

$$T_1=\frac{1}{2}\hbar\sqrt{A^2+B^2}\ ,\qquad T_2=-\frac{1}{2}\hbar\sqrt{A^2+B^2}$$

在 S^2，S_z 表象中有

$$T=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}B & -\mathrm{i}A\\ \mathrm{i}A & -B\end{pmatrix}$$

因而本征方程为

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}B & -\mathrm{i}A\\ \mathrm{i}A & -B\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}=T\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}$$

从而有

$$\begin{pmatrix}B\mp\sqrt{A^2+B^2}, & -\mathrm{i}A\\ \mathrm{i}A & -B\mp\sqrt{A^2\mp B^2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}=0$$

所以归一化后本征态为

$$\left[\frac{1}{A^2+\left(B\mp\sqrt{A^2\mp B^2}\right)^2}\right]^{1/2}\begin{pmatrix}+\mathrm{i}A\\ B\mp\sqrt{A^2+B^2}\end{pmatrix}$$

(2) 在 S^2, S_z 表象中，S_y 的本征态为

$$\left|S_y=\frac{\hbar}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-\mathrm{i}\\ 1\end{pmatrix}$$

所以，发现 $S_y=\hbar/2$ 的概率为

$$P_{\mp}=\frac{1}{2}\frac{1}{A^2+\left(B\mp\sqrt{A^2+B^2}\right)^2}(B\mp\sqrt{A^2+B^2}-A)^2$$

P_- 是当系统处在 $T=\frac{1}{2}\hbar\sqrt{A^2+B^2}$ 时的概率. P_+ 是处在 $T=-\frac{1}{2}\hbar\sqrt{A^2+B^2}$ 时的概率.

4.67　三个自旋 $\frac{1}{2}$(非全同)粒子系 Hamilton 量的求解

题 4.67　一个由三个自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子(非全同的)组成的系统的 Hamilton 量为

$$H=\frac{A}{\hbar^2}\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2+\frac{B}{\hbar^2}(\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2)\cdot\boldsymbol{S}_3$$

$\boldsymbol{S}_1,\boldsymbol{S}_2,\boldsymbol{S}_3$ 分别为三个粒子的自旋算符. 求系统的能级及能级简并度.

解　选取系统的力学量完全集为(H,S_{12}^2,S^2,S_z)，其中

$$\boldsymbol{S}_{12}=\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2,\qquad \boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}_{12}+\boldsymbol{S}_3=\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2+\boldsymbol{S}_3$$

则本征函数取为$|s_{12}s_3sm_1\rangle$，而定态方程为

$$H|s_{12}s_3sm_1\rangle=E|s_{12}s_3sm_1\rangle$$

$$H=\frac{A}{\hbar^2}\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2+\frac{B}{\hbar^2}(\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2)\cdot\boldsymbol{S}_3$$

$$=\frac{A}{2}\left[\frac{1}{\hbar^2}S_{12}^2-\frac{3}{4}-\frac{3}{4}\right]+\frac{B}{2}\left[\frac{1}{\hbar^2}S^2-\frac{1}{\hbar^2}S_{12}^2-\frac{3}{4}\right]$$

$$H|s_{12}s_3sm_1\rangle=\left\{\frac{A}{2}\left[(s_{12}+1)s_{12}-\frac{3}{2}+\frac{B}{2}\left[s(s+1)-s_{12}(s_{12}+1)-\frac{3}{4}\right]\right]\right\}|s_{12}s_3sm_1\rangle$$

$$E=\frac{A}{2}\left[s_{12}(s_{12}+1)-\frac{3}{2}\right]+\frac{B}{2}\left[s(s+1)-s_{12}(s_{12}+1)-\frac{3}{4}\right]$$

$\begin{cases}s_{12}=0,\\ s=1/2,\end{cases}$　$E=-\frac{3}{4}A$, 此能级简并度为 2

$\begin{cases}s_{12}=1,\\ s=1/2,\end{cases}$　$E=\frac{A}{4}-B$, 此能级简并度为 2

$\begin{cases}s_{12}=1,\\ s=3/2,\end{cases}$　$E=\frac{A}{4}+\frac{B}{2}$, 此能级简并度为 4

4.68　一个自旋为 1 的粒子 $H=AS_z+BS_x^2$ 的能级

题 4.68　一个自旋为 1 的粒子的 Hamilton 量为 $H=AS_z+BS_x^2$, 其中 A 和 B 是常数, 求系统的能级. 如果 $t=0$ 时, 粒子处在自旋 $S_z=+\hbar$ 的本征态, 求时间 t 时粒子自旋的期望值.

解　先求系统定态能级. 定态 Schrödinger 方程为

$$E\psi=H\psi=(AS_z+BS_x^2)\psi$$

式中，$\psi=\begin{pmatrix}\mu_1\\ \mu_2\\ \mu_3\end{pmatrix}$为自旋空间的矢量，而

$$S_x=\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&-\mathrm{i}\\0&\mathrm{i}&0\end{pmatrix}\hbar,\qquad S_x^2=\begin{pmatrix}0&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}\hbar^2,\qquad S_z=\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}&0\\\mathrm{i}&0&0\\0&0&0\end{pmatrix}\hbar$$

$$H=AS_z+BS_x^2=\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}A'&0\\\mathrm{i}A'&B'&0\\0&0&B'\end{pmatrix}$$

这里 $A'=A\hbar$, $B'=B\hbar^2$. 这时，求定态能级就转化为求矩阵的本征值

$$\det\begin{pmatrix}-E&-\mathrm{i}A'&0\\\mathrm{i}A'&B'-E&0\\0&0&B'-E\end{pmatrix}=0$$

能级为

$$E_0=B',\qquad E_\pm=\frac{B'\pm\sqrt{B'^2+4A'^2}}{2}$$

相应的本征解为

$$E_0=B',\qquad \varphi_{s0}=\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$$

$$E_+=\frac{B'}{2}+\frac{\sqrt{B'^2+4A'^2}}{2},\qquad \varphi_{s+}=\sqrt{\frac{\omega-B''}{2\omega}}\begin{pmatrix}1\\ i\sqrt{\dfrac{\omega+B''}{\omega-B''}}\end{pmatrix}$$

$$E_-=\frac{B'}{2}-\frac{\sqrt{B'^2+4A'^2}}{2},\qquad \varphi_{s-}=\sqrt{\frac{\omega+B''}{2\omega}}\begin{pmatrix}1\\ -i\sqrt{\dfrac{\omega-B''}{\omega+B''}}\end{pmatrix}$$

式中，$\omega=\sqrt{B'^2+4A'^2}/\hbar, B''=B'/\hbar=B\hbar$.

系统的一般波函数为

$$\varphi_s(t)=C_1\varphi_{s0}\exp\left[-\mathrm{i}\frac{B'}{\hbar}t\right]+C_2\varphi_{s+}\exp\left[-\mathrm{i}\frac{E_+}{\hbar}t\right]+C_3\varphi_{s-}\exp\left[-\mathrm{i}\frac{E_-}{\hbar}t\right]$$

根据初始条件 $\varphi_s(0)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\\mathrm{i}\\0\end{pmatrix}$，得

$$C_1=0,\qquad C_2=\frac{(\omega-B'')^{1/2}+(\omega+B'')^{1/2}}{2\omega^{1/2}}$$

$$C_3=\frac{(\omega+B'')^{1/2}-(\omega-B'')^{1/2}}{2\omega^{1/2}}$$

求系统自旋期望值

$$\langle S_x \rangle = \varphi_s^\dagger(t) S_x \varphi_s(t) = 0$$

其中用了 φ_{s0}，φ_{s+}，φ_{s-} 的正交性.

同理

$$\langle S_y \rangle = 0, \qquad \langle S_z \rangle = \varphi_s^\dagger(t) S_z \varphi_s(t) = \left[1 - \frac{2B^2\hbar^4}{\omega^2}\sin^2\left(\frac{\omega}{2}t\right)\right]\hbar$$

4.69 两个自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子系 Hamilton 量的求解

题 4.69 两个自旋 $\frac{1}{2}$ 的粒子组成的系统由等效 Hamilton 量

$$H = A(S_{1z} + S_{2z}) + B\boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2$$

描述，其中 $\boldsymbol{S}_1$、$\boldsymbol{S}_2$ 是两个自旋 S_{1z}、S_{2z} 是它们的 z 分量，A 和 B 为常数. 求该 Hamilton 量的所有能级.

解 选 $\boldsymbol{S}^2 = (\boldsymbol{S}_1 + \boldsymbol{S}_2)^2$ 与 $S_z = S_{1z} + S_z$ 的共同本征态 χ_{1m_s}.

当 $S=1$，$M_s = 0$，± 1，是三重态，对电子交换对称. $S=0$，$M_s = 0$ 是单态，对电子交换反对称. 首先有

$$\boldsymbol{S}^2 = (\boldsymbol{S}_1 + \boldsymbol{S}_2)^2 = \boldsymbol{S}_1^2 + \boldsymbol{S}_2^2 + 2\boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2 = \frac{3\hbar^2}{2} + 2\boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2$$

定态方程为

$$H\chi_{SM_s} = E\chi_{SM_s}$$

因为

$$\boldsymbol{S}^2\chi_{1M_s} = 2\hbar^2\chi_{1M}, \qquad \boldsymbol{S}^2\chi_{00} = 0$$

所以

$$\boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2\chi_{1M_s} = \left(\hbar^2 - \frac{3}{4}\hbar^2\right)\chi_{1M_s} = \frac{\hbar^2}{4}\chi_{1M_s}$$

$$\boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2\chi_{00} = -\frac{3}{4}\hbar^2\chi_{00}$$

又

$$S_z\chi_{1M_s} = (S_{1z} + S_{2z})\chi_{1M_s} = M_s\hbar\chi_{1M_s}$$

$$S_z\chi_{00} = 0$$

对三重态能级为

$$E = M_s\hbar A + \frac{\hbar^2}{4}B, \qquad M_s = 0, \pm 1$$

分为三条

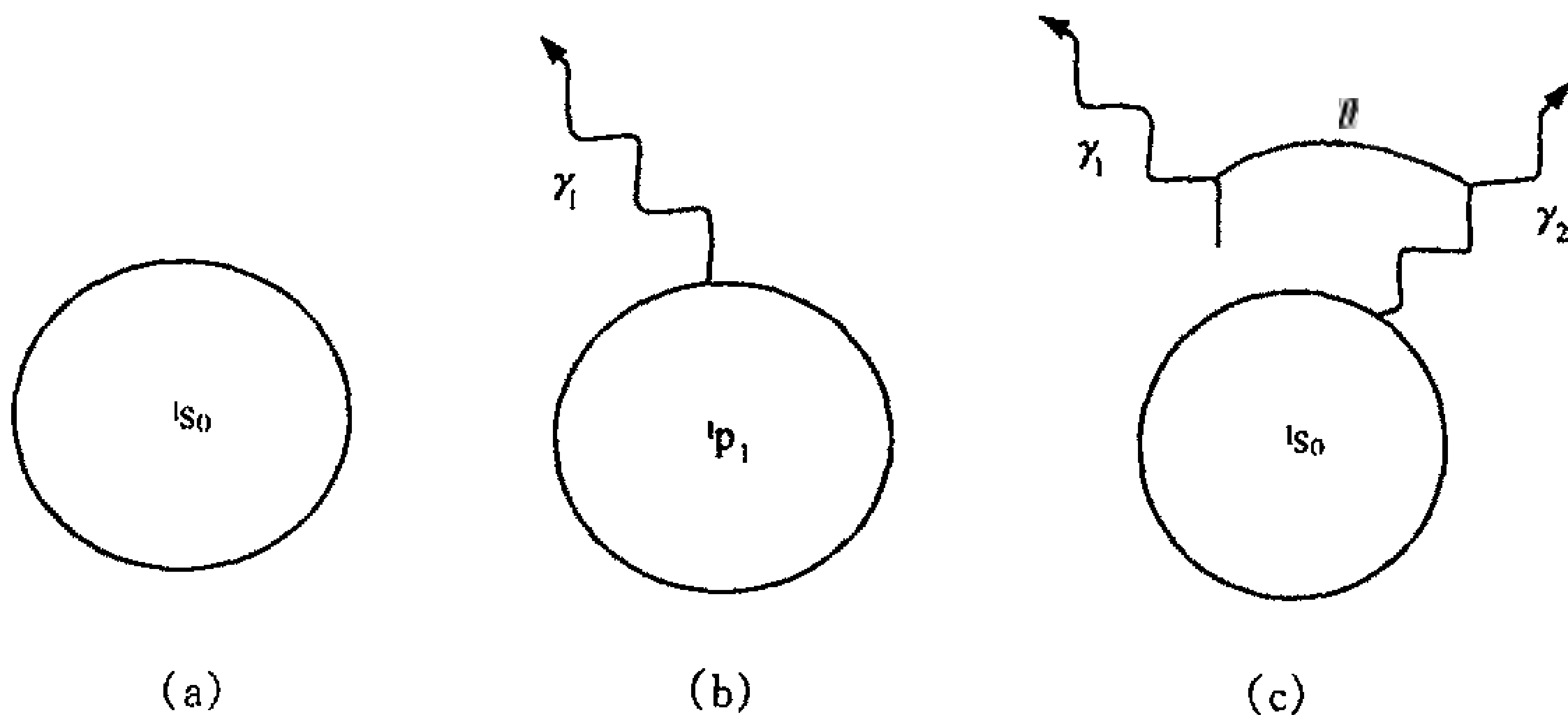
$$E_1 = \hbar A + \frac{\hbar^2}{4}B, \qquad E_2 = \frac{\hbar^2}{4}B, \qquad E_3 = -\hbar A + \frac{\hbar^2}{4}B.$$

对单态能级仅一条

$$E_0=-\frac{3}{4}\hbar^2 B$$

4.70　激发态原子二次发射的光子之间的关系

题 4.70　假定开始时原子处于$^1s_0$激发态(题图 4.70(a))，通过发射一个光子γ_1(题图 4.70(b))衰变到较低的$^1p_1$态. $^1p_1$态寿命较短，很快发射第二个光子γ_2(题图 4.70(c))而进入基态$^1s_0$. 用θ表示所发射的两个光子间夹角. (1) 对于此过程，不同θ的相对概率为何? (2) 求两个光子圆偏振方向相同与相反的概率比.



题图 4.70

$d^1_{m'm}$矩阵，即联系转动前后两个坐标系中的两角动量表象之间的转动矩阵，如下所示(知道它也许有所帮助)

$$(d^1_{m'm})=\begin{array}{c} \\ m'=1 \\ m'=0 \\ m'=-1\end{array}\begin{array}{c}\begin{array}{ccc} m=1 & m=0 & m=-1\end{array}\\ \begin{pmatrix}\dfrac{1+\cos\theta}{2} & -\dfrac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta & \dfrac{1-\cos\theta}{2}\\ \dfrac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta & \cos\theta & -\dfrac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta\\ \dfrac{1-\cos\theta}{2} & \dfrac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta & \dfrac{1+\cos\theta}{2}\end{pmatrix}\end{array}$$

θ是转动前z轴与转动后z'轴间夹角.

解　初始时刻原子处于激发$^1s_0$态，故原子角动量在任意z方向投影$L_z=0$. 发射一个光子后，若取发射方向为z方向，对光子有$L_z=\pm\hbar$. 相应地处于$^1p_1$态的原子$L_z=\mp\hbar$，即$m_z=\mp1$. 若取第二个光子发射方向为z'方向. z方向的角动量分量本征态投影到z'方向相当于将原态乘上一个$d^{(1)}$矩阵. 而只有$m'_z=\pm1$才可能在z'方向发射$L_z=\pm\hbar$的光子并使原子进入$^1s_0$态($m'_z=0$).

令

$$C_1=\langle m'_z=-1|d^{(1)}|m_z=+1\rangle$$

$$=(0,0,1)\begin{pmatrix} \frac{1+\cos\theta}{2} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta & \frac{1-\cos\theta}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta & \cos\theta & -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta \\ \frac{1-\cos\theta}{2} & \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta & \frac{1+\cos\theta}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}=\frac{1-\cos\theta}{2}$$

$$C_2=\langle m_z'=+1|d^{(1)}|m_z=+1\rangle$$

$$=(1,0,0)\begin{pmatrix} \frac{1+\cos\theta}{2} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta & \frac{1-\cos\theta}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta & \cos\theta & -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta \\ \frac{1-\cos\theta}{2} & \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta & \frac{1+\cos\theta}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}=\frac{1+\cos\theta}{2}$$

$$C_3=\langle m_z'=+1|d^{(1)}|m_z=-1\rangle=\frac{1-\cos\theta}{2}$$

$$C_4=\langle m_z'=-1|d^{(1)}|m_z=+1\rangle=\frac{1+\cos\theta}{2}$$

不同θ的相对概率

$$P(\theta)\propto\left(|C_1|^2+|C_2|^2+|C_3|^2+|C_4|^2\right)=1+\cos^2\theta$$

归一化得

$$P(\theta)=\sqrt{\frac{2}{3\pi}}(1+\cos^2\theta)$$

4.71　磁场中电子的自旋态

题 4.71　设有处于沿z轴正方向均匀磁场中的一个电子，测量表明，在$t=0$时电子自旋沿x轴正向. 用Ehrenfest定理计算$t>0$时电子处于(1) $S_x=\frac{1}{2}$；(2) $S_x=-\frac{1}{2}$；(3) $S_y=\frac{1}{2}$；(4) $S_y=-\frac{1}{2}$；(5) $S_z=\frac{1}{2}$；(6) $S_z=-\frac{1}{2}$的概率.

解　在经典图像中，自旋绕磁场方向运动. Ehrenfest 定理是说

$$\frac{\mathrm{d}\langle \boldsymbol{S}\rangle}{\mathrm{d}t}=\boldsymbol{\omega}\times\langle \boldsymbol{S}\rangle$$

式中，$\boldsymbol{\omega}=\frac{e\boldsymbol{B}}{mc}$，推导可如下进行

$$\frac{\mathrm{d}\langle \boldsymbol{S}\rangle}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[H,\boldsymbol{S}]}$$

$$H=g\cdot\frac{e}{2mc}\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{S}=\frac{e}{mc}S_zB$$

所以

$$\frac{\mathrm{d}\langle \boldsymbol{S}\rangle}{\mathrm{d}t}=\frac{eB}{\mathrm{i}\hbar mc}\overline{[S_z,\boldsymbol{S}]}=\frac{eB}{mc}\left[S_y\boldsymbol{i}-S_x\boldsymbol{j}\right]=\frac{e\boldsymbol{B}}{mc}\times\langle \boldsymbol{S}\rangle$$

式中，$\boldsymbol{i},\boldsymbol{j}$ 为 x,y 方向的单位矢量.

这个方程满足初始条件 $t=0$ 时 $\langle S_z\rangle=0$ ，$\langle S_x\rangle=\frac{1}{2}$ ，$\langle S_y\rangle=0$ 的解为 $\langle S_z\rangle=0$ ，$\langle S_x\rangle=\frac{1}{2}\cos\omega t$ ，$\langle S_y\rangle=\frac{1}{2}\sin\omega t$.

设时刻 t 时电子处于 $S_x=\frac{1}{2}$ 的概率为 p，处于 $S_x=-\frac{1}{2}$ 的概率则为 $1-p$ ，故有

$$\frac{1}{2}p-\frac{1}{2}(1-p)=\frac{1}{2}\cos\omega t$$

$$p=\cos^2\frac{\omega t}{2}, \qquad 1-p=\sin^2\frac{\omega t}{2}$$

采取同样的办法，求得处于 $S_y=\frac{1}{2}$ ，$S_y=-\frac{1}{2}$ ，$S_x=\frac{1}{2}$ ，$S_x=-\frac{1}{2}$ 的概率分别为

$$\cos^2\left(\frac{\omega t}{2}+\frac{\pi}{4}\right),\ \sin^2\left(\frac{\omega t}{2}+\frac{\pi}{4}\right),\ \frac{1}{2},\ \frac{1}{2}$$

4.72 磁场中自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子的自旋态

题 4.72 一具有磁矩自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子放于沿 x 轴方向的一常磁场中. 在 $t=0$ 时，发现粒子具有 $S_x=\frac{1}{2}$. 求在以后任意时刻发现具有 $S_y=\pm\frac{1}{2}$ 粒子的概率.

解 系统的 Hamilton 量(自旋部分)为

$$H=-\mu_0\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B}=-\frac{1}{2}\mu_0\sigma_x B$$

取 σ_x 表象，自旋波函数所满足的 Schrödinger 方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix}a_1\\a_2\end{pmatrix}+\frac{1}{2}\mu_0 B\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\a_2\end{pmatrix}=0$$

或

$$\begin{cases}\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}a_1}{\mathrm{d}t}+\dfrac{1}{2}\mu_0 Ba_2=0\\[2mm]\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}a_2}{\mathrm{d}t}+\dfrac{1}{2}\mu_0 Ba_1=0\end{cases}$$

因此

$$\frac{\mathrm{d}^2a_{1,2}}{\mathrm{d}t^2}+\left(\frac{\mu_0 B}{2\hbar}\right)^2a_{1,2}=0$$

得

$$a_{1,2}=A_{1,2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}+B_{1,2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}, \qquad \omega=\frac{\mu_0 B}{2\hbar}$$

初始条件：$a_1(0)=1,\ a_2(0)=0$，从而

$$\frac{\mathrm{d}a_1}{\mathrm{d}t}(0)=0,\qquad \frac{\mathrm{d}a_2}{\mathrm{d}t}(0)=\mathrm{i}\frac{\mu_0 B}{2\hbar}=\mathrm{i}\omega$$

因此

$$\begin{cases}A_1+B_1=1, & A_2+B_2=0\\ \omega(A_1-B_1)=0, & \omega(A_2-B_2)=\omega\end{cases}$$

解得

$$\begin{cases}A_1=\dfrac{1}{2}, & A_2=\dfrac{1}{2}\\ B_1=\dfrac{1}{2}, & B_2=-\dfrac{1}{2}\end{cases}$$

所以

$$\begin{pmatrix}a_1(t)\\ a_2(t)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\omega t\\ i\sin\omega t\end{pmatrix}$$

$S_y=+\dfrac{1}{2}$ 的本征态

$$\left|S_y(+)\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ \mathrm{i}\end{pmatrix}$$

$S_y=-\dfrac{1}{2}$ 的本征态

$$\left|S_y(-)\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -\mathrm{i}\end{pmatrix}$$

于是测得 $S_y=+\dfrac{1}{2}$ 的概率

$$P(+)=\left|\left\langle S_y(+)\middle|\psi(t)\right\rangle\right|^2=\left|\frac{1}{\sqrt{2}}(1,-\mathrm{i})\begin{pmatrix}\cos\omega t\\ \mathrm{i}\sin\omega t\end{pmatrix}\right|^2=\frac{1}{2}(1+\sin 2\omega t)$$

$S_y=-\dfrac{1}{2}$ 的概率

$$P(-)=\left|\left\langle S_y(-)\middle|\psi(t)\right\rangle\right|^2=\frac{1}{2}(1-\sin 2\omega t)$$

4.73　磁场中自旋 $\dfrac{1}{2}$ 粒子的 $\dfrac{\mathrm{d}\boldsymbol{S}}{\mathrm{d}t}$

题 4.73　在外磁场中一个自旋 $\dfrac{1}{2}$ 带电 $+e$ 的粒子的 Hamilton 量为 $H=-\dfrac{g}{2}\cdot\dfrac{e}{mc}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B}$．计算算符 $\dfrac{\mathrm{d}\boldsymbol{S}}{\mathrm{d}t}$．设 $\boldsymbol{B}=B\boldsymbol{y}$，$S_z(t)$ 的矩阵形式是什么？

解　在 Heisenberg 表象中

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{S}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\boldsymbol{S},H\right]=\frac{-ge}{\mathrm{i}2m\hbar c}\left[\boldsymbol{S},\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B}\right]$$

因此

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{S}}{\mathrm{d}t}=\frac{ge}{2mc}\boldsymbol{S}\times\boldsymbol{B}$$

若 $\boldsymbol{B}=By$ ，则

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}S_z(t)=\frac{geB}{2mc}S_x(t)$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}S_x(t)=-\frac{geB}{2mc}S_z(t)$$

得

$$S_z(t)=c_1\cos(g\omega t)+c_2\sin(g\omega t)$$

式中，$\omega=\dfrac{eB}{2mc}$ 由初始条件得

$$S_z(0)=c_1,\qquad S_z'(0)=c_2 g\omega=g\omega S_x(0)$$

因此

$$S_z(t)=S_z(0)\cos\left(\frac{geB}{2mc}t\right)+S_x(0)\sin\left(\frac{geB}{2mc}t\right)$$

4.74　$H=-J\left[\sigma_x^{(1)}\sigma_x^{(2)}+\sigma_y^{(1)}\sigma_y^{(2)}\right]$ 的解

题 4.74　两个电子被紧紧地束缚在某种固体的不同的邻近位置上. 这样，它们就是可分辨的且可用它们各自的 Pauli 自旋矩阵 $\boldsymbol{\sigma}^{(1)}$ 和 $\boldsymbol{\sigma}^{(2)}$ 描述. 它们的 Hamilton 算符形式为

$$H=-J\left[\sigma_x^{(1)}\sigma_x^{(2)}+\sigma_y^{(1)}\sigma_y^{(2)}\right]$$

其中 J 是一常数. (1) 这系统有多少个能级？能量是多少？各能级的简并度是多少？(2) 现在 z 方向上加上一个磁场. 求出新的能级、画出作为 B_z 函数的能级图.

解　(1) $H=-J\left[\sigma_x^{(1)}\sigma_x^{(2)}+\sigma_y^{(1)}\sigma_y^{(2)}\right]$

$$=-J\left[\frac{(\boldsymbol{\sigma}^{(1)}+\boldsymbol{\sigma}^{(2)})^2-\boldsymbol{\sigma}^{(1)2}-\boldsymbol{\sigma}^{(2)2}}{2}-\frac{(\sigma_z^{(1)}+\sigma_z^{(2)})^2-\sigma_z^{(1)2}-\sigma_z^{(2)2}}{2}\right]$$

$$=-J\left[\frac{(\boldsymbol{\sigma}^{(1)}+\boldsymbol{\sigma}^{(2)})^2-3-3}{2}-\frac{(\sigma_z^1+\sigma_z^2)^2-1-1}{2}\right]$$

$$=-J\left[\frac{(\boldsymbol{\sigma}^{(1)}+\boldsymbol{\sigma}^{(2)})^2-(\sigma_z^{(1)}+\sigma_z^{(2)})^2}{2}-2\right]$$

系统总自旋 $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}^{(1)}+\boldsymbol{S}^{(2)}=\dfrac{\hbar}{2}(\boldsymbol{\sigma}^{(1)}+\boldsymbol{\sigma}^{(2)})$ ，$S_z=S_z^{(1)}+S_z^{(2)}=\dfrac{\hbar}{2}(\sigma_z^{(1)}+\sigma_z^{(2)})$ ，S^2,S_z 与 H 相互对易. 由角动量耦合理论可知共可出现以下情况(S^2 的本征值为 $s(s+1)\hbar^2$).

S	S_z	相应态数	相应能量
1	1	1	0
	0	2	$-2J$
	-1	1	0
0	0	2	$2J$

其中第二、四行情况与两电子不可区分情况有区别. 所以

$$H=-2J\left[s(s+1)-s_z^2-1\right]$$

因此这系统有三个能级. 每个能级的能量分别为$2J,0,-2J$，各能级的简并度都是 2.

(2) 此时

$$H=-J\left[\sigma_x^{(1)}\sigma_x^{(2)}+\sigma_y^{(1)}\sigma_y^{(2)}\right]-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}$$

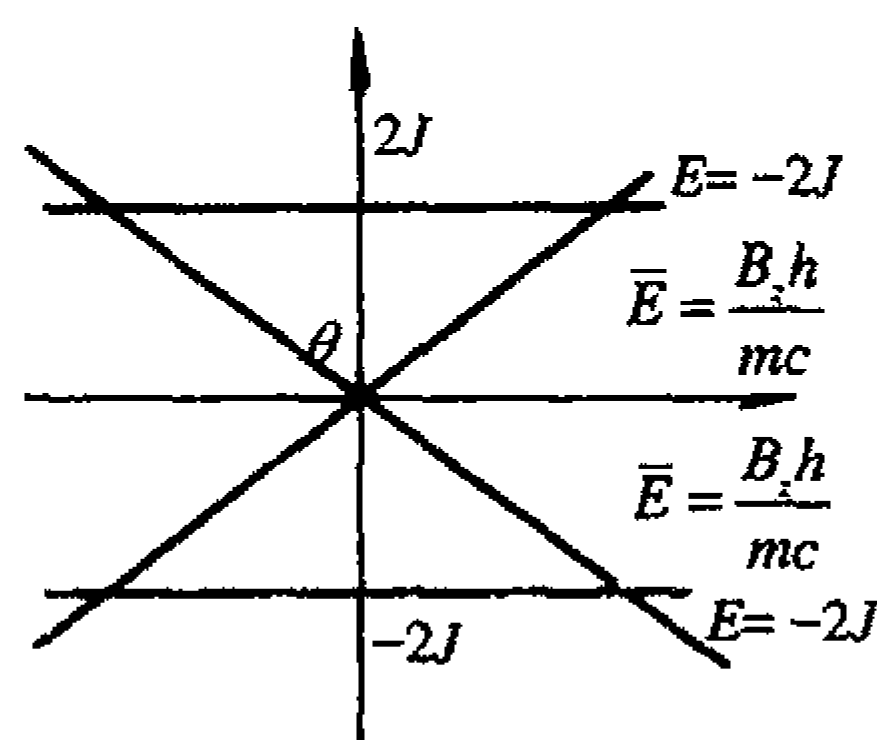
式中

$$\boldsymbol{\mu}=\frac{-e}{mc}\boldsymbol{S},\qquad \boldsymbol{B}=B_z\boldsymbol{z}\qquad -e\text{ 为电子电荷}$$

所以

$$H=-J\left[\sigma_x^{(1)}\sigma_x^{(2)}+\sigma_y^{(1)}\sigma_y^{(2)}\right]+\frac{e}{mc}S_zB_z=-2J\left[s\left(s+1\right)-s_z^2-1\right]$$

此时S^2,S_z与H仍可对易. 新的能级为：$2J$，$\frac{eB_z}{mc}\hbar$，$-\frac{eB_z}{mc}\hbar$，$-2J$. 作为B_z函数的能级图如题图 4.74 所示.



题图 4. 74

4.75　自由碳原子存在 L-S 精细结构耦合时，各可能态的 S,L,J 值及重数

题 4.75　一自由碳原子有 4 个成对 s 电子，2 个 p 电子. 假定存在 L-S 精细结构耦合，就是说L^2,S^2和J^2是好量子数. (1) 列表示各可能态的S，L，J值，指出相应的重数. (2) 哪一个态具有最低能量？给出理由.

解　(1) 碳原子有两个 1s 电子，两个 2s 电子，分别形成闭壳层. 于是原子态由两个 2p 电子组合决定. 因为是 L-S 耦合，$l_1=1,\ l_2=1$，可得

$$L=\left|l_1+l_2\right|=0,1,2$$

$$s_1=s_2=1/2,\qquad S=\left|s_1+s_2\right|=0,1$$

考虑到 Pauli 不相容原理及总波函数反对称要求，可得表 4.1.

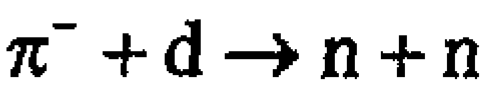
(2) 根据 Hund 规则，$^3P_0$态能量最低.

表 4.1

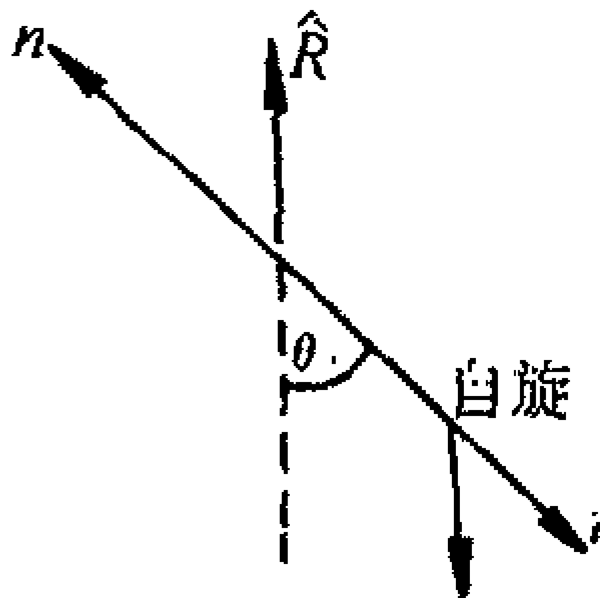
L	S	j	$^{2s+1}L_J$	重数
0	0	0	$^1S_0$	1
1	1	2	$^3P_2$	3
1	1	1	$^3P_1$	
1	1	0	$^3P_0$	
2	0	2	$^1D_2$	1

4.76 $\pi^- + d \to n + n$，中子对的轨道和总角动量

题 4.76 一个 π^- 介子(赝标粒子：自旋为零，奇宇称)最初被束缚在氘核周围，并处在最低的库仑能态上. 它被氘核(一质子及一中子处于 $^3S_1$ 态中)俘获，并使氘核转变成为一对中子



$$\pi^- + d \to n + n$$



(1) 中子对轨道角动量是多少? (2) 中子对的总自旋角动量是多少? (3) 发现两个中子的自旋均与氘核的自旋相反的概率是多少? (4) 如果氘核的自旋在最初全部指向 R 方向，发现自旋反向的中子的发射概率(单位立体角)的角分布是多少(题图 4.76)?

你将发现前几个球谐函数是有用的(没有归一化)

$$Y_{00} = 1, \qquad Y_{1,\pm1} = \mp\sin\theta e^{\pm i\phi}$$

$$Y_{10} = \cos\theta, \qquad Y_{2,\pm1} = \mp\sin 2\theta e^{\pm i\phi}$$

题图

解 (1), (2)反应前后宇称守恒，有

$$p(\pi^-)p(d)(-1)^{L_1} = p(n)p(n)(-1)^{L_2}$$

L_1, L_2 分别是 $\pi^- + d$ 及 $n + n$ 的轨道角动量. 但反应前 π^- 是在库仑势的最低能态中，$L_1 = 0$，且已知：$p(\pi^-) = -1$, $p(d) = 1$. 有

$$(-1)^{L_2} = -1, \qquad L_2 = 2m + 1, \qquad m = 0,1,2,\cdots$$

反应前后角动量守恒. 反应前 $J = 1$，所以反应后有

$$L_2 + S = J$$

n 与 n 的全同性要求总波函数反对称，现在空间波函数反对称，所以自旋函数必须对称，即 $S = 1$，所以 $L = 2,1,0$. 但 $L = 2m + 1$，所以 $L = 1, S = 1$.

总轨道角动量为 $\sqrt{2}\hbar$；总自旋角动量为 $\sqrt{2}\hbar$.

(3) 设反应前氘核子方向 $J_z = 1\hbar$，若中子对全部反向 $S_z = -1\hbar$，那么 $L_z = 2\hbar$，这是不可能的，因为 $L = 1$，所以概率为 0.

(4) 初始态为 $|J, J_z\rangle = |1,1\rangle$，将其变到非耦合表象

$$L = 1,\ S = 1,\ |L, L_z, S, S_z\rangle$$

从而有

$$|1,1\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}|1,0,1,1\rangle - \frac{\sqrt{2}}{2}|1,1,1,0\rangle$$

$$|1,1,1,0\rangle = Y_{11}(\theta,\phi)|1,0\rangle = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\cdot e^{i\phi}|1,0\rangle$$

此态中 $S_z=0$，显然有一个中子的 $S_z=\hbar/2$，所以发现的概率为

$$\frac{dp(\theta,\phi)}{d\Omega} = \frac{1}{2}\frac{3}{8\pi}\sin^2\theta = \frac{3}{16\pi}\sin^2\theta$$

4.77　$\Omega^- \to \Lambda + K^-$ 中的角动量问题

题 4.77　一个 Ω^- 超子$\left(自旋\frac{3}{2}，质量 167.2\mathrm{MeV}/c^2，内禀宇称为+\right)$可通过弱作用衰变为一个 Λ 超子$\left(自旋\frac{1}{2}，质量 1116\mathrm{Mev}/c^2，内禀宇称为+\right)$和一个 K^- 介子(自旋 0，质量 $494\mathrm{Mev}/c^2$，内禀宇称为−)即 $\Omega^- \to \Lambda + K^-$．(1) 当 Ω^- 角动量 z 分量具有最大可能值时，即初态 $\left|\Omega_j^m\right\rangle = \Omega_{3/2}^{+3/2}\rangle$，求 K^- 介子关于 Ω^- 自旋方向角分布的最一般形式(设 Ω^- 静止). (2) 如果衰变过程宇称守恒，可能在角分布形式上加上什么约束?

解　(1) 初态为$\left|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle$，末态自旋部分为$\left|\frac{1}{2},s_z\right\rangle$，轨道部分为 $Y_{lm}(\theta,\varphi)=|l,m\rangle$，于是末态波函数为

$$|l,m\rangle\left|\frac{1}{2},s_z\right\rangle$$

由角动量守恒可得

$$l=1,2,\qquad m=\frac{3}{2}-s_z$$

p 波：$l=1$，末态为 $|1,1\rangle\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$

d 波：$l=2$，末态为 $|2,2\rangle\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$，$|2,1\rangle\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$

$$\psi_p = Y_{11}(\theta,\varphi)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

$$\psi_d = \sqrt{\frac{4}{5}}|2,2\rangle\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle - \sqrt{\frac{1}{5}}|2,1\rangle\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = \begin{pmatrix}-\sqrt{\frac{1}{5}}Y_{21}(\theta,\varphi)\\ \sqrt{\frac{4}{5}}Y_{22}(\theta,\varphi)\end{pmatrix}$$

$$\psi = \alpha_d\psi_d + \alpha_p\psi_p$$

$$= \begin{pmatrix}\alpha_p Y_{11}(\theta,\varphi) - \alpha_d\sqrt{\frac{1}{5}}Y_{21}(\theta,\varphi)\\ \sqrt{\frac{4}{5}}\alpha_d Y_{22}(\theta,\varphi)\end{pmatrix}$$

所以

$$\psi^*\psi=\frac{3}{8\pi}\sin^2\theta\left[\left|\alpha_p\right|^2+\left|\alpha_d\right|^2-2R_e\alpha_p{}^*\alpha_d\cos\theta\right]$$

$$I\propto\sin^2\theta(1+\alpha\cos\theta)$$

式中

$$\alpha=\frac{-2\,\mathrm{Re}\,\alpha_p^*\alpha_d}{\left|\alpha_p\right|^2+\left|\alpha_d\right|^2}$$

这就是角分布的最一般形式.

(2) 如果衰变过程中宇称守恒，则末态宇称为正，即

$$(-1)^l P_K P_A=+1,\qquad P_K P_A=-1$$

于是

$$l=1$$

$$\psi_f=\mathrm{Y}_{11}(\theta,\varphi)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

$$\psi_f^*\psi_f=\frac{3}{8\pi}\sin^2\theta=\frac{3}{8\pi}(1-\cos^2\theta)$$

所以

$$I\propto\left(1-\cos^2\theta\right)$$

4.78 两角动量 $j_1=1, j_2=\frac{1}{2}$ 的 C-G 系数

题 4.78 给定两个角动量 j_1 和 j_2(如 L 和 S 及其相应的波函数),其中 $j_1=1$ 且 $j_2=1/2$. 对于总角动量 $\boldsymbol{J}=j_1+j_2$，$m=m_1+m_2$，当(1) $j=3/2$，$m=3/2$；(2) $j=3/2$，$m=1/2$ 时，分别计算 C-G 系数. 考虑下列反应

$$K^-p\to\sum{}^-\pi^+$$

$$\to\sum{}^+\pi^-$$

$$\to\sum{}^0\pi^0$$

$$K^-n\to\sum{}^-\pi^0$$

$$\to\sum{}^0\pi^-$$

假设这些过程是共振的,所以为纯同位素态. 在同位旋守恒基础上求出相对比率. (3) 对 $I=1$ 共振态；(4) 对 $I=0$ 共振态 K，n，$\sum$，π 的同位旋各为 $1/2$，$1/2$，1 和 1.

解 (1) 容易得出

$$\left|\frac{3}{2}\frac{3}{2}\right\rangle=\left|11\right\rangle\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle$$

(2) 定义算符 $J_-=J_{1-}+J_{2-}$，则有

$$J_-\left|\frac{3}{2}\frac{3}{2}\right\rangle=\left(J_{1-}+J_{2-}\right)|11\rangle\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle$$

即

$$\hbar\sqrt{3}\left|\frac{3}{2}\frac{1}{2}\right\rangle=\hbar\sqrt{2}|10\rangle\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle+\hbar|11\rangle\left|\frac{1}{2}\frac{-1}{2}\right\rangle$$

所以

$$\left|\frac{3}{2}\frac{1}{2}\right\rangle=\sqrt{\frac{2}{3}}|10\rangle\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle+\sqrt{\frac{1}{3}}|11\rangle\left|\frac{1}{2}\frac{-1}{2}\right\rangle$$

下面计算反应截面的相对比值. 为此将初、末态的同位旋态用耦合表象表示

$$\left|K^-p\right\rangle=\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle=\sqrt{\frac{1}{2}}|1,0\rangle-\sqrt{\frac{1}{2}}|0,0\rangle$$

$$\left|\sum{}^-\pi^+\right\rangle=|1,-1\rangle|1,1\rangle=\sqrt{\frac{1}{6}}|2,0\rangle-\sqrt{\frac{1}{2}}|1,0\rangle+\sqrt{\frac{1}{2}}|0,0\rangle$$

$$\left|\sum{}^+\pi^-\right\rangle=|1,1\rangle|1,-1\rangle=\sqrt{\frac{1}{6}}|2,0\rangle-\sqrt{\frac{1}{2}}|1,0\rangle+\sqrt{\frac{1}{2}}|0,0\rangle$$

$$\left|\sum{}^0\pi^0\right\rangle=|1,0\rangle|1,0\rangle=\sqrt{\frac{2}{3}}|2,0\rangle-\sqrt{\frac{1}{3}}|0,0\rangle$$

$$\left|K^-n\right\rangle=\left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle=|1-1\rangle$$

$$\left|\sum{}^-\pi^0\right\rangle=|1=1\rangle|1,0\rangle=\sqrt{\frac{1}{2}}|2-1\rangle-\sqrt{\frac{1}{2}}|1-1\rangle$$

$$\left|\sum{}^0\pi^-\right\rangle=|1\quad 0\rangle|1-1\rangle=\sqrt{\frac{1}{2}}|2-1\rangle+\sqrt{\frac{1}{2}}|1-1\rangle$$

(3) 对于 $I=1$ 共振态，我们得到反应的截面相对比率为

$$\sigma(\sum{}^-\pi^+):\sigma(\sum{}^+\pi^-):\sigma(\sum{}^0\pi^0)=1:1:0$$

$$\sigma(\sum{}^-\pi^0):\sigma(\sum{}^0\pi^-)=1:1$$

(4) 对于 $I=0$ 共振态(只有前一组反应有这个同位旋态)，反应截面的相对比率为

$$\sigma(\sum{}^-\pi_+):\sigma(\sum{}^+\pi_-):\sigma(\sum{}^0\pi_0)=1:1:1$$

4.79 电子在外磁场中运动时的自旋态及平均极化率

题 4.79 考虑一个电子在均匀沿 z 方向磁场中运动. 在 $t=0$ 时刻测量到电子自旋沿正 y 方向. 求在 $t>0$ 时的自旋态及沿 x 方向的平均极化率(正比于 S_x 的期望值).

解 由于只关心自旋态，且磁场空间均匀，故应当也可能分离掉空间部分，Hamilton 量可取为

$$H=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}=\mu_c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}=\hbar\omega\sigma_x$$

式中，$\omega=\dfrac{\mu_cB}{\hbar}=\dfrac{eB}{2mc}$. 初始条件为 $\psi(t=0)=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ \mathrm{i}\end{pmatrix}$ 由 Schrödinger 方程

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=H\psi$$

解得

$$\psi(t)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}e^{-i\omega t}\\ ie^{i\omega t}\end{pmatrix}$$

于是

$$\langle S_x\rangle=\langle\psi(t)|S_x|\psi(x)\rangle=\frac{\hbar}{2}\cdot\frac{1}{2}\left(e^{i\omega t},-ie^{-i\omega t}\right)\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}e^{-i\omega t}\\ ie^{i\omega t}\end{pmatrix}=-\frac{\hbar}{2}\sin 2\omega t$$

4.80 电子处于外磁场中时沿 x 和 z 方向的极化

题 4.80 考虑一沿 z 方向为均匀的磁场中的一个电子. 该电子自旋被测量到是沿正 y 轴 (在 t_0 时刻). 在 $t>t_0$ 时，沿 x 和 z 方向的极化是多少(即 $2S_x$ 和 $2S_z$ 的期望值)?

解 自旋态矢的 Schrödinger 方程为

$$i\hbar\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}a(t)\\ b(t)\end{pmatrix}=-\mu_e\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}\begin{pmatrix}a(t)\\ b(t)\end{pmatrix}$$

式中，$\mu_e=\dfrac{|e|\hbar}{2m_ec}$是电子的磁矩数值

B 沿 z 方向，故上式化为

$$i\hbar\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}a(t)\\ b(t)\end{pmatrix}=-\mu_eB\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a(t)\\ b(t)\end{pmatrix}$$

得方程组

$$i\hbar\frac{d}{dt}a(t)=-\mu_eBa(t)$$

$$i\hbar\frac{d}{dt}b(t)=-\mu_eBb(t)$$

其解为

$$a(t)=a(t_0)e^{\frac{i}{\hbar}\mu_eB(t-t_0)}$$

$$b(t)=b(t_0)e^{-\frac{i}{\hbar}\mu_eB(t-t_0)}$$

t_0 时刻电子自旋沿正 y 方向，因此

$$S_y\begin{pmatrix}a(t_0)\\ b(t_0)\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}a(t_0)\\ b(t_0)\end{pmatrix}$$

得

$$-ib(t_0)=a(t_0)$$

$$ia(t_0)=b(t_0)$$

由归一化知

$$|a(t_0)|^2+|b(t_0)|^2=1$$

得

$$a(t_0)=\frac{1}{\sqrt{2}},\qquad b(t_0)=\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}$$

$t>t_0$ 时刻沿 x 方向极化为

$$\langle 2S_x\rangle=\hbar(a^*,b^*)\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$$

$$=\hbar(a^*b+b^*a)=\hbar\sin\left(\frac{2\mu_e}{\hbar}B(t-t_0)\right)$$

$$\langle 2S_x\rangle=\hbar(a^*,b^*)\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\hbar(a^*a-b^*b)=0$$

4.81　两个自旋$\frac{1}{2}$粒子系在给定态下，总自旋 $S=0$ 的概率

题 4.81　两个自旋为1/2的粒子组成一复合系统. 自旋 A 在 $S_z'=+1/2$ 的本征态，自旋 B 在 $S_x'=+1/2$ 的本征态. 求发现系统总自旋为零的概率.

解　在非耦合的表象中，总自旋为零的态可以表示如下

$$|0\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left|S_{A_z}=\frac{1}{2}\right\rangle\left|S_{B_z}=-\frac{1}{2}\right\rangle-\left|S_{A_z}=-\frac{1}{2}\right\rangle\left|S_{B_z}=\frac{1}{2}\right\rangle\right]$$

式中，$|0\rangle$ 是总自旋为零的态；S_{A_z}，S_{B_z} 分别代表 A、B 的自旋的 z 轴分量，现在这两个1/2粒子处在这样的态中

$$|Q\rangle=\left|S_{A_z}=\frac{1}{2}\right\rangle\left|S_{B_x}=+\frac{1}{2}\right\rangle$$

那么发现总自旋为 0 的概率为

$$P=|\langle 0|Q\rangle|^2$$

在 (S^2,S_z) 的表象中，S_x 可以写成

$$S_x=\frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$$

求 S_x 的本征方程，得其本征函数 $|S_x=+1/2\rangle$ 在 S^2、S_x 中的表示为

$$|S_x=+1/2\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[|S_z=1/2\rangle+\left|S_z=-\frac{1}{2}\right\rangle\right]$$

这样有

$$\left\langle S_z=-\frac{1}{2}\middle|S_x=+\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}$$

所以

$$\langle 0|Q\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\langle S_{B_z} = -\frac{1}{2}\middle| S_{B_x} = +\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{2}$$

$$P = \left|\langle Q|0\rangle\right|^2 = \frac{1}{4} = 25\%$$

4.82 与电子自旋有关的测量问题

题 4.82 (1) 一个电子的自旋观测到沿 z 轴方向，问第二次测量到电子在 xz 平面内沿与 z 轴成 θ 角的方向的概率为多大？(2) 氘核内中子和质子的总自旋为三重态. 已观测到总角动量平行于 z 轴方向，求第二次测量到质子自旋平行于 z 轴方向的概率.

解 (1) 电子自旋初态为

$$|\psi_0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

自旋方向在 xz 平面内与 z 成 θ 角方向的态为

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \cos\theta/2 \\ \sin\theta/2 \end{pmatrix}$$

于是第二次观测到电子自旋在 xz 平面沿与 z 轴成 θ 角方向的概率为

$$p(\theta) = \left|\langle\psi|\psi_0\rangle\right|^2 = \left|(\cos\theta/2, \sin\theta/2)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}\right|^2 = \cos^2\theta/2$$

(2) 中子-质子系统(氘核)的自旋初态为

$$|\psi_0\rangle = |11\rangle = \left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{\mathrm{n}}\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{\mathrm{p}}$$

要使质子在第二次观测时自旋仍平行于 z 轴方向，考虑到氘核内中子自旋和质子自旋平行，末态仍为

$$|\psi_f\rangle = \left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{\mathrm{n}}\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{\mathrm{p}}$$

这就是说第二次测量得质子自旋在 z 轴的概率为 1.

4.83 为什么氘核不存在 P 态和 G 态

题 4.83 氘是质子与中子的束缚态，其总角动量 $J=1$. 现已知道它主要是由 $S(l=0)$ 态组成并且有很少的 $D(l=2)$ 态参与进来. (1) 解释为什么 P 态不能参与；(2) 解释为什么 G 态不能参与；(3) 计算 n-p 系统(总角动量 $J=1$)处在纯 D 态时的磁矩；假设 n 和 p 自旋耦合形成总自旋 s，然后总自旋再与轨道角动量 l 耦合形成总角动量 J. 用核磁子表示结果. 质子及中子磁矩分别为 2.79 和 −1.91 核磁子.

解 (1) S、D 态的宇称为正，而 P 态的宇称为负，由于宇称守恒，开始时为 S 态的量子态在任何时刻都不可能有 P 态混入.

(2) 质子与中子组成的系统的自旋可能值为 1 或 0，因为 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}$. 所以在 $S=0$ 时有

$L=1$，为 P 态，由(1)知不可能存在，在 $S=1$ 时 $L=2,1,0$，所以宇称准许的只有 S 或 D 态，不能有 $G(l=4)$ 混入.

(3) 对于纯 D 态，总自旋 $S=1$，轨道角动量(对 n, p 质心) $L=2$.

总的磁矩应该等于总自旋的磁矩 $\boldsymbol{\mu}_s$ 与轨道角动量的磁矩 $\boldsymbol{\mu}_l$ 的耦合.

总自旋 $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}_{\rm p}+\boldsymbol{S}_{\rm n}$，$\boldsymbol{\mu}_s=\boldsymbol{\mu}_{\rm p}+\boldsymbol{\mu}_{\rm n}$ ($\boldsymbol{\mu}_{\rm p},\boldsymbol{\mu}_{\rm n}$ 分别为 p, n 的自旋磁矩)，把总 $\boldsymbol{\mu}_s$ 沿总 S 方向投影取平均，有

$$\mu_s=\frac{(g_{\rm p}\mu_N S_{\rm p}+g_N\mu_N S_{\rm n})\cdot S}{S(S+1)}S=\frac{1}{2}(g_P+g_N)\mu_N S$$

式中

$$\mu_N=\frac{e\hbar}{2m_pc};\qquad g_{\rm p}=5.58,\qquad g_N=-3.82$$

质子运动对质心产生磁矩；但是中子并不对质心产生磁矩，这样有

$$\mu_L=\frac{e\hbar}{2m_pc}\cdot \boldsymbol{L}_{\rm p}=\mu_N\cdot \boldsymbol{L}_{\rm p}$$

$\boldsymbol{L}_{\rm p}$ 是 p 对质心的角动量，因为 $\boldsymbol{L}_{\rm p}+\boldsymbol{L}_{\rm n}=\boldsymbol{L}$，且可以认为 $L_{\rm p}=L_{\rm n}$，有 $L_{\rm p}=\frac{1}{2}L$ (质心在连线中点)，这样就有 $\boldsymbol{\mu}_L=\frac{1}{2}\mu_N\boldsymbol{L}$

耦合之后的总磁矩

$$\mu_r=\frac{\left[\frac{1}{2}\mu_N L\cdot J+\frac{1}{2}(g_{\rm p}+g_N)\mu_N S\cdot J\right]J}{J(J+1)}$$

因 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}$. 有

$$\mu=\left[\frac{1}{2}\mu_N\cdot 3+\frac{1}{2}(g_{\rm p}+g_{\rm N})\mu_N(-1)\right]\boldsymbol{J}/2$$

$$=\left[1.5-\frac{1}{2}(g_{\rm p}+g_{\rm N})\right]\frac{1}{2}\mu_N\boldsymbol{J}=0.31\mu_N\boldsymbol{J}$$

取 $\boldsymbol{J}$ 方向的投影并使 J_x 为最大值 $J=1$，从而有

$$\mu=0.31\mu_N$$

4.84　Stern-Gerlach 装置中的电子

题 4.84　预选建立一个 Stern-Gerlach 实验，使得一个电子的自旋 z 分量是 $-\hbar/2$. 在 $t=0$ 时加入一个沿 x 方向的均匀磁场 B (用 cgs 单位). (1) 经过时间 T 后，测量自旋 z 分量的结果是什么? (2) 如果不是测量自旋的 z 分量，而是 x 分量，则结果如何?

解法一　自旋波函数满足的方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\frac{e\hbar B}{2mc}\sigma_x\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\hbar\omega\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$$

式中，$\omega=eB/(2mc)$

$$\begin{cases} \mathrm{i}\dot{a} = \omega b \\ \mathrm{i}\dot{b} = \omega a \end{cases}$$

$$\ddot{a} = -\mathrm{i}\omega b = -\omega^2 a$$

$$a = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} + C\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}, \qquad A、C \text{是待定常数}$$

$$b = \frac{\mathrm{i}}{\omega}\dot{a} = -\left(A\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} - C\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\right)$$

初始条件

$$a(0) = 0, \qquad b(0) = 1$$

$$\begin{cases} A + C = 0, \\ C - A = 1. \end{cases}$$

得到

$$\begin{cases} A = -\dfrac{1}{2} \\ C = \dfrac{1}{2} \end{cases}$$

所以

$$\begin{cases} a = \dfrac{1}{2}\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} - \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\right) = -\mathrm{i}\sin\omega t \\ b = \dfrac{1}{2}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\right) = \cos\omega t \end{cases}$$

任意 t 时刻波函数为

$$\psi(t) = \begin{pmatrix} -\mathrm{i}\sin\omega t \\ \cos\omega t \end{pmatrix}$$

(1) $t = T$ 时

$$\psi(T) = \begin{pmatrix} -\mathrm{i}\sin\omega T \\ \cos\omega T \end{pmatrix} = -\mathrm{i}\sin\omega T \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \cos\omega T \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

所以，测量自旋 z 分量为正的概率为 $\sin^2\omega T$，测量自旋 z 分量为负的概率为 $\cos^2\omega T$.

(2) σ_x 在 σ_z 对角化表象中的本征函数为

$$\psi(\sigma_x = 1) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad \psi(\sigma_x = -1) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

所以

$$\psi(T) = \begin{pmatrix} -\mathrm{i}\sin\omega T \\ \cos\omega T \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega T} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega T} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega T}\psi(\sigma_x = 1) + \frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega T}\psi, \qquad \sigma_x = -1$$

因此测量自旋 x 分量为正、为负的概率相等，均为

$$\left|\frac{e^{-i\omega T}}{\sqrt{2}}\right|^2=\left|\frac{e^{i\omega T}}{\sqrt{2}}\right|^2=\frac{1}{2}$$

解法二　可用本征态矢展开法. Hamilton 量为

$$H=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}=\frac{eB\hbar}{2mc}\sigma_x$$

σ_x 的本征态矢为 $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$, $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$. 于是

$$\psi(t=0)=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}-\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}\right]$$

所以

$$\psi(t)=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}e^{-i\omega t}-\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}e^{i\omega t},\qquad \omega=\frac{eB}{2mc}$$

(1)

$$\psi(t)=\begin{pmatrix}-i\sin\omega t\\ \cos\omega t\end{pmatrix}$$

T 时刻

$$P_{z\uparrow}=\sin^2\omega T,\qquad P_{z\downarrow}=\cos^2\omega T$$

(2)

$$\begin{cases}P_{x\uparrow}=\left|\dfrac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\omega t}\right|^2=\dfrac{1}{2}\\ P_{x\downarrow}=\dfrac{1}{2}\end{cases}$$

4.85　处于基态的碱原子通过 Stern-Gerlach 装置

题 4.85　处于基态的一个碱原子通过 Stern-Gerlach 装置，使得出射原子的自旋处于 $+z$ 方向. 然后原子在沿 x 方向的磁场中花费时间 τ. 求出此时间的终点，原子可能通过自旋 $-z$ 方向的 Stern-Gerlach 选择器的概率. 这个概率可以等于 1 吗？如果可以，如何达到？

解　初始状态

$$\psi(t=0)=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

Hamilton 量为

$$H=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{H}=\frac{|e|\hbar H}{2mc}\sigma_x\equiv\hbar\omega\sigma_x,\qquad \omega=\frac{|e|H}{2mc}$$

运动方程为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}=\hbar\omega\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}=\hbar\omega\begin{pmatrix}\psi_2\\ \psi_1\end{pmatrix}$$

即

$$\begin{cases} \mathrm{i}\dot{\psi}_1 = \omega\psi_2 \\ \mathrm{i}\dot{\psi}_2 = \omega\psi_1 \end{cases}$$

$$\ddot{\psi}_1 + \omega^2\psi_1 = 0$$

所以

$$\begin{cases} \psi_1(t) = a\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} + b\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \\ \psi_2(t) = \dfrac{\mathrm{i}}{\omega}\dot{\psi}_1 = -a\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} + b\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \end{cases}$$

由初始条件

$$\begin{cases} \psi_1(0) = 1 \\ \psi_2(0) = 0 \end{cases}$$

得

$$\begin{cases} a + b = 1 \\ -a + b = 0 \end{cases}$$

$$a = b = \frac{1}{2}$$

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \\ -\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\omega t \\ -\mathrm{i}\sin\omega t \end{pmatrix} = \cos\omega t\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \mathrm{i}\sin\omega t\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

所以经过时间 τ 后，通过 S-G 装置，自旋在 $-z$ 方向的概率为

$$\left|(0,\ 1)\begin{pmatrix} \cos\omega t \\ -\mathrm{i}\sin\omega t \end{pmatrix}\right| = \sin^2\omega\tau = \frac{1-\cos 2\omega\tau}{2}$$

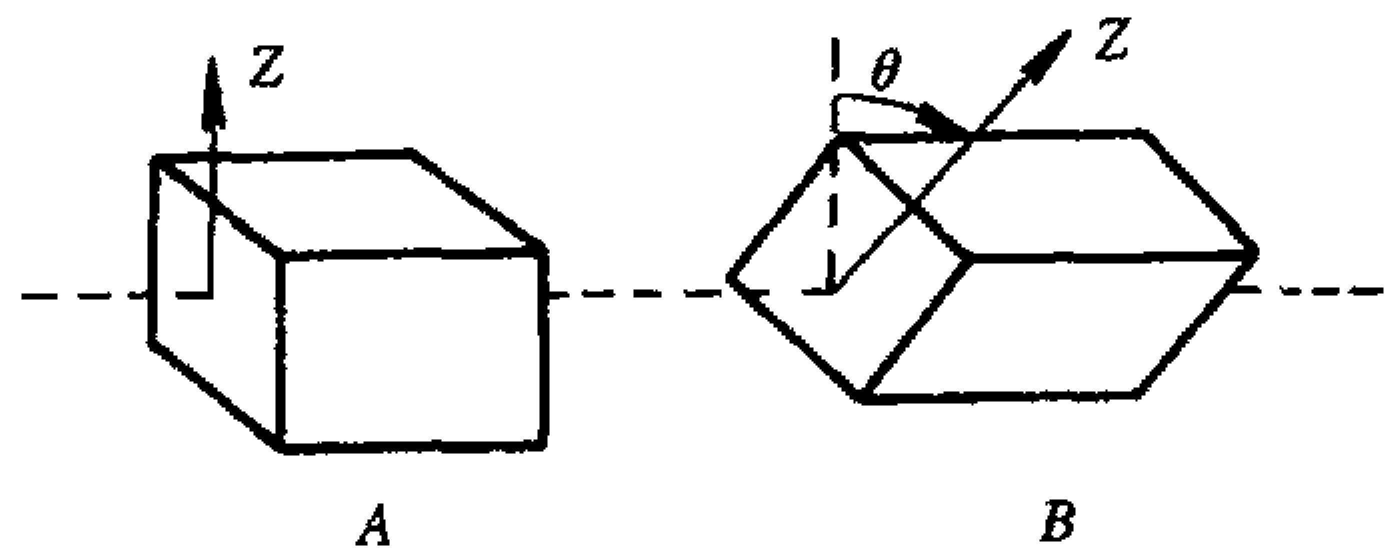
显然概率可以为 1，这时要求

$$1-\cos 2\omega\tau = 2\text{，即}\cos 2\omega\tau = -1$$

$$\tau = \frac{(2n+1)\pi}{2\omega} = (2n+1)\frac{mc\tau}{|e|H}$$

所以选 $\tau = (2n+1)\dfrac{mc\tau}{|e|H}$ 时，就可让概率等于 1.

4.86　自旋 $\dfrac{1}{2}$ 粒子束相继通过两个 Stern-Gerlach 装置



题图 4.86

题 4.86　一束自旋 1/2 的粒子通过 Stern-Gerlach 装置，按照粒子的量子数 m_s 的不同，入射粒子束被分裂成两束. 移去其中的一束，另一束再通过类似的装置，其磁场相对于第一个装置有倾斜角 α (题图 4.86)离开第二个装置后，两束粒子相对数目是多少？应用 Pauli 自旋公式推导结果.

解　对于空间任意方向，

$\boldsymbol{n}=(\sin\theta\cos\varphi,\sin\theta\sin\varphi,\cos\theta)$. 自旋算符

$$S_n=\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi}\\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta\end{pmatrix}$$

设它的本征态为$\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$，则本征方程为$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$. 得$\lambda=\pm1$，另有

$$(a^*\ b^*)\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=|a|^2+|b|^2=1$$

最后求得本征态为

$$|\uparrow\boldsymbol{n}\rangle=\begin{pmatrix}\cos(\theta/2)\\ \sin(\theta/2)e^{i\varphi}\end{pmatrix}$$

$$|\downarrow\boldsymbol{n}\rangle=\begin{pmatrix}-\sin(\theta/2)e^{i\varphi}\\ \cos(\theta/2)\end{pmatrix}$$

对于本题情况，$\varphi=0,\theta=\alpha$.

若离开第一个 Stern-Gerlach 装置后留下的粒子是自旋向上，则

$$|\uparrow Z\rangle=c|\uparrow\boldsymbol{n}\rangle+d|\downarrow\boldsymbol{n}\rangle$$

$$c=\langle\uparrow\boldsymbol{n}|\uparrow Z\rangle=\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right),\qquad d=\langle\downarrow\boldsymbol{n}|\uparrow Z\rangle=-\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)$$

所以经过第二个 Stern-Gerlach 装置后出射的两束粒子数比为

$$\frac{|c|^2}{|d|^2}=\frac{\cos^2(\alpha/2)}{\sin^2(\alpha/2)}=\cot^2\frac{\alpha}{2}$$

若离开第一个 Stern-Gerlach 装置后留下的粒子是自旋向下的，则有

$$|\downarrow Z\rangle=c|\uparrow\boldsymbol{n}\rangle+d|\downarrow\boldsymbol{n}\rangle$$

$$c=\langle\uparrow\boldsymbol{n}|\downarrow Z\rangle=\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right),\qquad d=\langle\downarrow\boldsymbol{n}|\downarrow Z\rangle=\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)$$

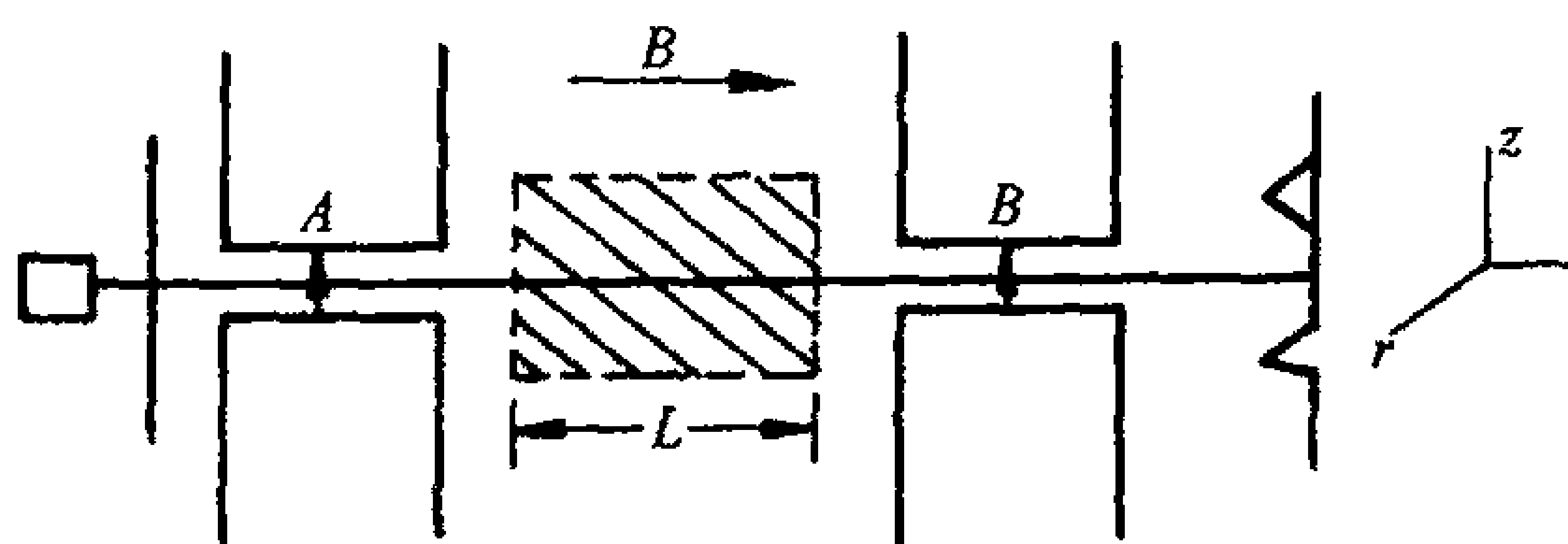
所以粒子数比为

$$\frac{\sin^2(\alpha/2)}{\cos^2(\alpha/2)}=\tan^2\frac{\alpha}{2}$$

4.87　Stern-Gerlach 试验(银原子)

题 4.87　银原子的磁矩基本上等于它的未配对价电子的磁矩，即$\mu=-\gamma s$，这时$\gamma=\dfrac{e}{mc}$，s是电子自旋. 设一束银原子以速度v通过一个磁场梯度沿z方向的 Stern-Gerlach 装置，下面只考虑$m_s=\dfrac{\hbar}{2}$的束. 然后束流进入一个长为L的区域，在这个区域内有一常磁场B_0沿束流方向(y轴). 然后进入另一个与前面的全同的 Stern-Gerlach 装置(题图 4.87). 清楚地描述在束流冲出第二个 Stern-Gerlach 装置的时候所看到的现象. 用V,L,B_0及问题中的

常数表示出射束流的强度. 用量子力学的运动方程推导你的结果.



题图 4.87

解 在第二个 Stern-Gerlach 装置的出口处如进行摄影，则可看到两条黑线，分别是由 $m_s = \hbar/2$ 和 $m_s = -\hbar/2$ 的银原子沉积而成.

在 L 区间内，体系的状态用 $|t\rangle$ 表示. 当束流进入 L 时 $t=0$，只考虑 $m_s = \hbar/2$ 的原子，所以 $|t=0\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$. 而体系的 Hamilton 量为

$$H = -\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B} = -\frac{\gamma\hbar B_0}{2}\sigma_y$$

则

$$\begin{aligned}|t\rangle &= \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Ht\right)|t=0\rangle = \exp\left(\frac{\mathrm{i}\gamma B_0 t}{2}\sigma_y\right)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\\ &= \left[\cos\left(\frac{\gamma B_0 t}{2}\right)+\mathrm{i}\sigma_y\sin\left(\frac{\gamma B_0 t}{2}\right)\right]\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\\ &= \cos\left(\frac{\gamma B_0 t}{2}\right)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} - \sin\left(\frac{\gamma B_0 t}{2}\right)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\end{aligned}$$

所以出口处 $I_+ = I_0\cos^2\left(\frac{\gamma B_0 t}{2}\right)$，$I_- = I_0\sin^2\left(\frac{\gamma B_0 t}{2}\right)$，$I_0$ 为进入 L 时的束流强度.

由于束流离开 L 区间时，$t = L/V$，所以强度比为

$$\cot^2\left(\frac{\gamma B_0 L}{2V}\right)$$

4.88 存在自旋-自旋相互作用两个自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子系，在外磁场中情况讨论

题 4.88 考虑由两个带等量异号电荷的自旋1/2粒子耦合而成的系统. 两粒子的自旋分别为 s_1 和 s_2、自旋-自旋相互作用能为 ΔE，系统放在均匀磁场 $\boldsymbol{H} = H\hat{z}$ 中. 自旋相互作用的 Hamilton 量为

$$H = (\Delta E/4)(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2) - (\boldsymbol{\mu}_1+\boldsymbol{\mu}_2)\cdot\boldsymbol{H}$$

其中 $\mu_i = g_i\mu_0 s_i$ 是第 i 个粒子的磁矩. 当用算符 $\sigma_i = 2s_i$ 的 z 分量的本征态来表示时，系统的 4 个状态的自旋波函数为

$$\psi_1 = \alpha_1\alpha_2, \quad \psi_2 = s\beta_1\alpha_2 + c\alpha_1\beta_2, \quad \psi_3 = c\beta_1\alpha_2 - s\alpha_1\beta_2, \quad \psi_4 = \beta_1\beta_2$$

式中

$$(\sigma_z)_i\alpha_i=\alpha_i,\qquad (\sigma_z)_i\beta_i=-\beta_i$$

$$s=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1-\frac{x}{\sqrt{1+x^2}}\right)^{1/2},\qquad c=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1+\frac{x}{\sqrt{1+x^2}}\right)^{1/2}$$

$$x=\mu_0 H(g_2-g_1)/\Delta E$$

(1) 求每个波函数ψ_i相应的能量本征值. 讨论极限情况$\mu_0 H/\Delta E\gg 1$和$\mu_0 H/\Delta E\ll 1$. (2) 假设初态$\psi(0)$中粒子 1 沿 z 方向极化，而粒子 2 是非极化的，求粒子 1 的极化与时间的依赖关系$P_{1z}(t)=\langle\psi(t)|\sigma_{1z}|\psi(t)\rangle$. (3) 再讨论$\mu_0 H/\Delta E\ll 1$和$\mu_0 H/\Delta E\gg 1$两种极限情形.

解　(1) 利用

$$\sigma_{xi}\alpha_i=\beta_i,\qquad \sigma_{xi}\beta_i=\alpha_i$$

$$\sigma_{yi}\alpha_i=\mathrm{i}\beta_i,\qquad \sigma_{yi}\beta_i=-\mathrm{i}\alpha_i$$

$$\sigma_{zi}\alpha_i=\alpha_i,\qquad \sigma_{zi}\beta_i=-\beta_i$$

又因

$$H=(\Delta E/4)(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)-(\boldsymbol{\mu}_1+\boldsymbol{\mu}_2)\cdot\boldsymbol{H}$$

$$=(\Delta E/4)(\sigma_{1x}\sigma_{2x}+\sigma_{1y}\sigma_{2y}+\sigma_{1z}\sigma_{2z})-\frac{1}{2}\mu_0 H(g_1\sigma_{1z}+g_2\sigma_{2z})$$

得

$$H\psi_1=(\Delta E/4)(\beta_1\beta_2-\beta_1\beta_2+\alpha_1\alpha_2)-\frac{1}{2}\mu_0 H(g_1+g_2)\cdot\alpha_1\alpha_2$$

$$=\left(\Delta E/4-\frac{g_1+g_2}{2}\mu_0 H\right)\alpha_1\alpha_2=\left(\Delta E/4-\frac{g_1+g_2}{2}\cdot\mu_0 H\right)\psi_1$$

所以

$$E_1=\Delta E/4-\frac{1}{2}(g_1+g_2)\mu_0 H$$

$$H\psi_2=\frac{\Delta E}{4}[s(\alpha_1\beta_2+\alpha_1\beta_2-\beta_1\alpha_2)+c(\beta_1\alpha_2+\beta_1\alpha_2-\alpha_1\beta_2)]$$

$$+\frac{1}{2}(g_1-g_2)\mu_0 H(s\beta_1\alpha_2-c\alpha_1\beta_2)$$

$$=[(\Delta E/4)(2c-s)-(\Delta E/2)xs]\beta_1\alpha_2$$

$$+[(\Delta E/4)(2s-c)+(\Delta E/2)xc]\alpha_1\beta_2$$

$$=(\Delta E/4)(2c/s-2x-1)s\beta_1\alpha_2+(\Delta E/4)(2s/c+2x-1)$$

而

$$2c/s-2x=2\frac{(1+x/\sqrt{1+x^2})^{1/2}}{(1-x/\sqrt{1+x^2})^{1/2}}-2x=2\sqrt{1+x^2}$$

$$=2(\sqrt{1+x^2}-x)+2x=2s/c+2x$$

所以

$$H\psi_2=(\Delta E/4)(2\sqrt{1+x^2}-1)\psi_2$$

$$E_2=(\Delta E/4)(2\sqrt{1+x^2}-1)$$

类似地

$$E_3=(-\Delta E/4)(2\sqrt{1+x^2}+1).$$

$$E_4=(\Delta E/4)+\frac{g_1+g_2}{2}\mu_0 H.$$

(2) 粒子 2 未极化，处于混合态. 在 α_2,β_2 中展开，其态 ξ_2 可表示为

$$\xi_2=a\alpha_2+b\beta_2$$

式中，$|a|^2=\frac{1}{2}$，$|b|^2=\frac{1}{2}$. 所以初始时刻的总波函数

$$\begin{aligned}\psi(0)&=\alpha_1\xi_2=\alpha_1(a\alpha_2+b\beta_2)\\&=a\psi_1+b\frac{c}{c^2+s^2}\psi_2-b\frac{s}{c^2+s^2}\psi_3\\&=a\psi_1+bc\psi_2-bs\psi_2\end{aligned}$$

式中

$$c^2+s^2=\frac{1}{2}\left(1+\frac{x}{\sqrt{1+x^2}}\right)+\frac{1}{2}\left(1-\frac{x}{\sqrt{1+x^2}}\right)=1$$

因此

$$\psi(t)=a\psi_1 e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t}+bc\psi_2 e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t}-hs\psi_3 e^{-i\frac{E_3}{\hbar}t}$$

利用

$$\sigma_{1x}\psi_1=\alpha_1\alpha_2$$

$$\sigma_{1z}\psi_2=\alpha_{1z}\left(s\beta_1\alpha_2+c\alpha_1\beta_2\right)=-s\beta_1\alpha_2+c\alpha_1\beta_2$$

$$\sigma_{1z}\psi_3=\alpha_{1z}\left(s\beta_1\alpha_2-s\alpha_1\beta_2\right)=-\left(c\beta_1\alpha_2+s\alpha_1\beta_2\right)$$

得到

$$\begin{aligned}P_{1z}(t)&=\langle\psi(t)|\sigma_{1z}|\psi(t)\rangle\\&=|a|^2+|b|^2\left\langle e^{-iE_2t/\hbar}c(s\beta_1\alpha_2+c\alpha_1\beta_2)-e^{-iE_3t/\hbar}s(c\beta_1\alpha_2-s\alpha_1\beta_2)\right|\\&\quad\cdot\left|e^{-iE_2t/\hbar}c(-s\beta_1\alpha_2+c\alpha_1\beta_2)+e^{-iE_3t/\hbar}s(c\beta_1\alpha_2+s\alpha_1\beta_2)\right\rangle\\&=\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\left[(s^2-c^2)^2+4s^2c^2\cos\left[(E_2-E_3)\frac{t}{\hbar}\right]\right]\\&=\frac{1}{2}+\frac{1}{2(1+x^2)}\left[x^2+\cos\left(\sqrt{1+x^2}\frac{\Delta Et}{\hbar}\right)\right]\\&=1-\frac{1}{1+x^2}\sin^2\left(\sqrt{1+x^2}\frac{\Delta Et}{2\hbar}\right)\end{aligned}$$

(3) 在极限情形 $\mu_0 H/\Delta E\gg 1$，则 $x\gg 1$，所以

$$E_1=\frac{\Delta E}{4}-\frac{g_1+g_2}{2}\mu_0H\sim-\frac{1}{2}(g_1+g_2)\mu_0H$$

$$E_2=\frac{\Delta E}{4}\left(2\sqrt{1+x^2}-1\right)\sim(\Delta E/4)\times2x=\frac{1}{2}(g_2-g_1)\mu_0H$$

$$E_3=-\frac{\Delta E}{4}\left(1+2\sqrt{1+x^2}\right)\sim-\frac{1}{2}(g_2-g_1)\mu_0H$$

$$E_4=\frac{\Delta E}{4}+\frac{g_1+g_2}{2}\mu_0H\sim\frac{1}{2}(g_1+g_2)\mu_0H$$

$$P_{1z}(t)\sim1$$

当$\mu_0H/\Delta E\ll1$，则$x\ll1$，有

$$E_1\sim E_4\sim\Delta E/4$$

$$E_2=\frac{\Delta E}{4}\left(2\sqrt{1+x^2}-1\right)\sim\Delta E/2$$

$$E_3\sim\Delta E/2$$

$$P_{1z}(t)\sim1-\sin^2(\Delta Et/2\hbar)$$

4.89　处于$^2P_{1/2}$态氢原子在弱和强外磁场中的有效磁矩

题 4.89　一氢原子处于$^2P_{1/2}$态，总角动量沿z轴，计算下列问题的结果：(1) 发现电子自旋向下的概率是多少？(2) 求在球坐标下，单位立体角发现电子的概率$P(\theta,\varphi)$(与径向和自旋无关). (3) 沿正z方向有一弱磁场. 在这磁场中，原子的有效磁矩是多少？(4) 从初态开始，逐步加强磁场直到由磁场产生的能级移动远大于精细结构. 终态轨道和自旋量子数是多少(假设 Hamilton 量关于磁场是线性的)？终态的有效磁矩是多少？

解　(1) 由题所给条件可知

$$l=1,\qquad s=\frac{1}{2},\qquad J=\frac{1}{2},\qquad J_x=\frac{1}{2}$$

从耦合表象变到非耦合表象

$$|J,J_x\rangle=\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle=\sqrt{\frac{2}{3}}|1,1\rangle\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle-\sqrt{\frac{1}{3}}|1,0\rangle\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$$

因此

$$P_{\downarrow}=\left(\sqrt{\frac{2}{3}}\right)^2=\frac{2}{3}$$

(2)

$$|J,J_x\rangle=\sqrt{\frac{1}{3}}\begin{pmatrix}\sqrt{2}Y_{11}\\Y_{10}\end{pmatrix}$$

$$P(\theta,\phi)\mathrm{d}\Omega=\frac{1}{3}(2Y_{11}^*Y_{11}+Y_{10}^*Y_{10})\mathrm{d}\Omega$$

$$P(\theta,\phi)=\frac{1}{3}\left(2\times\frac{3}{8\pi}\sin^2\theta+\frac{3}{4\pi}\cos^2\theta\right)=\frac{1}{4\pi}$$

(3) 弱磁场中J,J_z是好量子数，态不变，有效磁矩是

$$\mu=\left\langle\frac{1}{2},\frac{1}{2}\middle|\mu_z\middle|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$=g\frac{e}{2mc}\left\langle\frac{1}{2},\frac{1}{2}\middle|J_z\middle|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$=g\cdot\frac{e\hbar}{4mc}$$

$$g=1+\frac{J(J+1)-l(l+1)+s(s+1)}{2J(J+1)}=\frac{2}{3}$$

$$\mu=\frac{e\hbar}{6mc}$$

(4) 加强磁场时，磁矩与磁场的相互作用远大于自旋轨道耦合作用. 因此可忽略后者. 这时 l,s 是好量子数. 与磁场有关的 Hamilton 量为

$$W=-\boldsymbol{\mu}_l\cdot\boldsymbol{B}-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}=\frac{eB}{2mc}\hat{l}_z+\frac{eB}{mc}\hat{s}_z$$

磁场从 0 逐步加强时，态一直保持在能量最低. 从 W 的表达式可知，磁场变为强场后，只有 $l_z=-1$, $s_z=-1/2$ 时，能量才能保持最低，因此终态量子数是

$$l=1,\qquad l_z=-1,\qquad s=\frac{1}{2},\qquad s_z=-\frac{1}{2}$$

而有效磁矩是

$$\mu=\bar{\mu}_{lz}+\bar{\mu}_{sz}=-\frac{e\hbar}{2mc}-\frac{e\hbar}{2mc}=-\frac{e\hbar}{mc}$$

4.90　磁矩为 $\boldsymbol{M}=\gamma\boldsymbol{s}$ $(s=1/2)$ 在外磁场中的 $\langle\boldsymbol{s}\rangle$

题 4.90　讨论一个中性粒子，它的内禀角动量为 $\sqrt{s(s+1)}$，其中 $s=\hbar/2$. 即它是一个 1/2 自旋的粒子. 假设这粒子有一磁矩 $\boldsymbol{M}=\gamma\boldsymbol{s}$，其中 γ 是一常数. 这一粒子的量子力学态可以用自旋空间来描述，它的基矢是 s_z 的两个本征态 $|+\rangle$ 及 $|-\rangle$ 分别代表其自旋方向平行与反平行于 z 轴 $\left((\text{即 } s_z|+\rangle=\frac{\hbar}{2}|+\rangle, s_z|-\rangle=-\frac{\hbar}{2}|-\rangle\right)$. 在 $t=0$ 时，系统状态为 $|\psi\rangle(t=0)=|+\rangle$. 这一粒子沿 y 轴运动，通过一沿 y 轴方向的均匀磁场 $\boldsymbol{B}=B_0\hat{y}$. (1) $|\psi(t)\rangle$ 用 $|+\rangle$ 及 $|-\rangle$ 表示的表达式是什么? (2) $\langle s_x\rangle$，$\langle s_y\rangle$，$\langle s_z\rangle$ 作为时间函数的表达式.

解　(1) 粒子的 Hamilton 算符为

$$H=-\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{B}=-\gamma s_yB$$

在 (s^2,s_z) 表象中，$s_y=\frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ i & 0\end{pmatrix}$，容易求出 s_y 的两个本征态

$$\left|s_y=\frac{1}{2}\hbar\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-\mathrm{i}\\1\end{pmatrix},\qquad \left|s_y=-\frac{1}{2}\hbar\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}\mathrm{i}\\1\end{pmatrix}$$

容易看出

$$H\left|s_y=\frac{1}{2}\hbar\right\rangle=-\gamma B\frac{1}{2}\hbar\left|s_y=\frac{1}{2}\hbar\right\rangle$$

$$H\left|s_y=-\frac{1}{2}\hbar\right\rangle=\gamma B\frac{1}{2}\hbar\left|s_y=-\frac{1}{2}\hbar\right\rangle$$

所以任何一粒子态可以表示成

$$|\psi(t)\rangle=c_1\left|s_y=\frac{1}{2}\hbar\right\rangle e^{i\frac{1}{2}\gamma Bt}+c_2\left|s_y=-\frac{1}{2}\hbar\right\rangle e^{-i\frac{1}{2}\gamma Bt}$$

$t=0$时，$|\psi(t)\rangle=\left|s_z=\frac{1}{2}\hbar\right\rangle$,有

$$\left|s_z=\frac{1}{2}\hbar\right\rangle=c_1\left|s_y=\frac{1}{2}\hbar\right\rangle+c_2\left|s_y=-\frac{1}{2}\hbar\right\rangle$$

$$c_1=\left\langle s_y=\frac{1}{2}\hbar\middle|s_z=\frac{1}{2}\hbar\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}i$$

$$c_2=\left\langle s_y=-\frac{1}{2}\hbar\middle|s_z=\frac{1}{2}\hbar\right\rangle=-\frac{1}{\sqrt{2}}i$$

$$|\psi(t)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}i\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-i\\1\end{pmatrix}e^{i\frac{1}{2}\gamma Bt}-\frac{1}{\sqrt{2}}i\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}i\\1\end{pmatrix}e^{-i\frac{1}{2}\gamma Bt}$$

$$=\cos\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right)\left|s_z=\frac{1}{2}\hbar\right\rangle-\sin\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right)\left|s_z=-\frac{1}{2}\hbar\right\rangle$$

(2)
$$\langle s_z\rangle=\left[\cos\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right)-\sin\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right)\right]\frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right)\\-\sin\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right)\end{pmatrix}$$

$$=\frac{1}{2}\hbar\left[\cos\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right),\ \sin\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right)\right]\begin{bmatrix}\cos\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right)\\-\sin\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right)\end{bmatrix}=\frac{1}{2}\hbar\cos(\gamma Bt)$$

$\langle s_y\rangle=0$，因为$t=0$时$\langle s_y\rangle=0$，所以$\hat{s}_y$为守恒量

$$\langle s_x\rangle=\left[\cos\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right)-\sin\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right)\right]\frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right)\\-\sin\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right)\end{pmatrix}$$

$$=\frac{1}{2}\hbar\left[-\sin\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right),\ \cos\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right)\right]\begin{bmatrix}\cos\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right)\\-\sin\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right)\end{bmatrix}=-\frac{1}{2}\hbar\sin(\gamma Bt)$$

4.91 磁共振问题(1)

题 4.91 一个自旋为1/2，磁矩为μ的粒子处于磁场$\boldsymbol{B}$中

$$\boldsymbol{B}=B_0\hat{z}+B_1\cos\omega t\hat{x}-B_1\sin\omega t\hat{y}$$

这常在磁共振实验中采用. 假设$t=0$时粒子自旋沿$+z$轴向上$\left(m_s=+\dfrac{1}{2}\right)$，求在$t>0$时发现粒子自旋向下$\left(m_s=-\dfrac{1}{2}\right)$的概率.

解 体系的Hamilton量为

$$H=-\mu\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}$$

令

$$\omega_0=\frac{\mu B_0}{\hbar},\qquad \omega_1=\frac{\mu B_1}{\hbar}$$

$$H=-\hbar\omega_0\sigma_z-\hbar\omega_1\begin{pmatrix}0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} & 0\end{pmatrix}$$

而体系的波函数为

$$|t\rangle=\begin{pmatrix}a(t)\\ b(t)\end{pmatrix}$$

Schrödinger 方程$\mathrm{i}\partial_t|t\rangle=H|t\rangle$，可导出$a,b$的方程

$$\begin{cases}\dot{a}=+\mathrm{i}\omega_0 a+\mathrm{i}\omega_1\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\omega t}b\\ \dot{b}=-\mathrm{i}\omega_0 b+\mathrm{i}\omega_1\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}a\end{cases}\tag{1}$$

令

$$\begin{cases}a=\alpha\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\omega_0 t}\\ b=\beta\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}\end{cases}$$

则方程(1)可写成

$$\begin{cases}\alpha=\mathrm{i}\omega_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}(-2\omega_0+\omega)t}\beta\\ \beta=\mathrm{i}\omega_1\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(-2\omega_0+\omega)t}\alpha\end{cases}\tag{2}$$

假设α,β具有如下形式

$$\begin{cases}\alpha=A_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}(-2\omega_0+\omega+\Omega)t}\\ \beta=A_2\mathrm{e}^{\mathrm{i}\Omega t}\end{cases}$$

式中，A_1，A_2为常数，则

$$\begin{cases}(-2\omega_0+\omega+\Omega)A_1-\omega_1 A_2=0\\ -\omega_1 A_1+\Omega A_2=0\end{cases}\tag{3}$$

方程(3)有非零解的充要条件是系数行列式为零，从而解出Ω

$$\Omega_{\pm}=-\left(-\omega_0+\frac{\omega}{2}\right)\pm\sqrt{(-\omega_0+\omega/2)^2+\omega_1^2}$$

所以 β 的一般形式为

$$\beta=A_{2+}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\Omega_+t}+A_{2-}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\Omega_-t}$$

由方程(2)可得

$$\alpha=+\frac{1}{\omega_1}\exp\left[\mathrm{i}(-2\omega_0+\omega)t\right]\left[\Omega_+A_{2+}\exp(\mathrm{i}\Omega_+t)+\Omega_-A_{2-}\exp(\mathrm{i}\Omega_-t)\right]$$

代入初始条件

$$|t=0\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a(0)\\b(0)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\alpha(0)\\\beta(0)\end{pmatrix}$$

可得

$$\frac{1}{\omega_1}(\Omega_+A_{2+}+\Omega_-A_{2-})=1$$

$$A_{2+}+A_{2-}=0$$

所以

$$A_{2+}=-A_{2-}=\omega_1/(\Omega_+-\Omega_-)$$

$$=\frac{\omega_1}{2\sqrt{(\omega_0-\omega/2)^2+\omega_1^2}}$$

$$b(t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0t}\beta(t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0t}A_{2+}$$

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\Omega_+t}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}\Omega_-t}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t/2}\cdot2\mathrm{i}A_{2+}\sin\left(\sqrt{(\omega_0-\omega/2)^2+\omega_1^2t}\right)$$

$$=\frac{\mathrm{i}\omega_1\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t/2}}{\sqrt{(\omega_0-\omega/2)^2+\omega_1^2}}\sin\left(\sqrt{(\omega_0-\omega/2)^2+\omega_1^2t}\right)$$

所求概率为

$$P=\left|\langle Z\downarrow|t\rangle\right|^2$$

所以

$$P=|b(t)|^2=\frac{\omega_1^2\sin^2(\sqrt{(\omega_0-\omega/2)^2+\omega_1^2}t)}{\sqrt{(\omega_0-\omega/2)^2+\omega_1^2}}$$

4.92　磁矩 $\boldsymbol{\mu}=\mu_0\boldsymbol{\sigma}$ 粒子处于磁场 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{B}_0\sigma_z+\boldsymbol{B}_1\sigma_x$ 中状态随时间的演化

题 4.92　一磁矩为 $\boldsymbol{\mu}=\mu_0\boldsymbol{\sigma}$ 的自旋1/2体系处于一个沿 z 轴的均匀常磁场 B_0 中. 在 $0<t<T$ 时，加入一个沿 x 轴的均匀常磁场 B_1，此时，体系仍处于一个常磁场中，只不过大小不同，方向沿 z' 轴而已，在 $t=0$ 及以前，体系处于 $m=1/2$ 态，m 是 s 的 z 分量. (1) 在 $t=0^+$ 时，体系自旋沿 z' 轴的投影为 $m'=\pm1/2$ 的振幅是多少？(2) 在 $0<t<T$ 时，关于 z' 轴的能量本征态如何随时间演变？(3) 在 $t=T$ 时观察到体系处于自旋态 $m=-1/2$ 的概率幅是

多少(用 z 与 z' 的夹角 θ 和频率 $\omega_0 = \mu_0 B_0/\hbar$ 表示结果)?

解　(1) 在 s_z 表象中，$s_{z'}$ 的本征矢为

$$\begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} -\sin\frac{\theta}{2} \\ \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

分别对应于本征值 $s_{z'} = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$，所以 $m' = \pm\frac{1}{2}$ 的概率幅分别为

$$C_+ = \left(\cos\frac{\theta}{2} \sin\frac{\theta}{2}\right)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \cos\frac{\theta}{2}$$

$$C_- = \left(-\sin\frac{\theta}{2} \cos\frac{\theta}{2}\right)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = -\sin\frac{\theta}{2}$$

(2) 在 $0 < t < T$ 时的 Hamilton 量为

$$H = -\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B} = -\mu_0\left(B_0\sigma_z + B_1\sigma_x\right) = -\mu_0\begin{pmatrix} B_0 & B_1 \\ B_1 & -B_0 \end{pmatrix}$$

$$x_+(0) = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \qquad x_-(0) = \begin{pmatrix} -\sin\frac{\theta}{2} \\ \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

$$\theta = \arctan\left(\frac{B_1}{B_0}\right), \qquad Hx_\pm(0) = \pm Ex_\pm(0)$$

$$E = -\mu_0 B_0/\cos\theta = -\mu_0 B, \qquad B = \sqrt{{B_0}^2 + {B_1}^2}$$

所以，在 $0 < t < T$ 时，本征态 $x_\pm(0)$ 随时间的演变为

$$x_\pm(t) = \mathrm{e}^{\mp\mathrm{i}Et/\hbar}x_\pm(0) = \mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\mu_0 Bt/\hbar}x_\pm(0)$$

(3) **解法一**

$$C_-(T) = (0,\ 1)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}HT/\hbar}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\mathrm{i}B_1}{\sqrt{B_0^2 + B_1^2}}\sin\left(\frac{\mu_0 T}{\hbar}\sqrt{B_0^2 + B_1^2}\right) = \mathrm{i}\sin\theta\sin\frac{\mu_0 BT}{\hbar}$$

解法二

$$\psi(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \cos\frac{\theta}{2}\cdot x_+(0) - \sin\frac{\theta}{2}\cdot x_-(0)$$

$$\psi(t) = x_+(0)\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu_0 Bt/\hbar} - x_-(0)\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu_0 Bt/\hbar}$$

于是

$$C_-(T) = \beta^\dagger\psi(T) = \cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu_0 BT/\hbar} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu_0 BT/\hbar}\right) = \mathrm{i}\sin\theta\sin\frac{\mu_0 BT}{\hbar}, \qquad \beta = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

4.93　磁共振问题(2)

题 4.93　磁矩为$\boldsymbol{\mu}=\mu\boldsymbol{\sigma}$的自旋1/2系统被放入直流磁场$H_0 e_z$中，其自旋态$\left|+\frac{1}{2}\right\rangle$能量为$\hbar\omega_0$，而$\left|-\frac{1}{2}\right\rangle$态的能量为 0. $t=0$时，该系统处于$\left|-\frac{1}{2}\right\rangle$态，此时突然加一磁场$H(e_x\cos\omega_0 t+e_y\sin\omega_0 t)$. 忽略弛豫效应，求在$t$时刻自旋系统的能量，以$\omega_0 H$，$C\equiv\left\langle+\frac{1}{2}\middle|\mu_x+\mu_y\middle|-\frac{1}{2}\right\rangle$表出. 为什么该自旋系统能量不守恒?

解法一　$H=-\boldsymbol{\mu}\cdot(\boldsymbol{H}+\boldsymbol{H}_0)=-\mu\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{H}+\boldsymbol{H}_0)=-\mu\begin{pmatrix}H_0 & He^{-i\omega_0 t}\\ He^{i\omega_0 t} & -H_0\end{pmatrix}$

系统的 Schrödinger 方程为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=H\psi$$

令$\psi=\begin{pmatrix}a(t)\\ b(t)\end{pmatrix}$，得

$$\begin{cases}\dot{a}=i\dfrac{\mu}{\hbar}\left[H_0 a+Hbe^{-i\omega_0 t}\right]\\[2ex] \dot{b}=i\dfrac{\mu}{\hbar}\left[Hae^{i\omega_0 t}-H_0 b\right]\end{cases}$$

令

$$a=A\exp\left[-i\left(\Omega+\frac{1}{2}\omega_0\right)t\right]$$

$$b=B\exp\left[-i\left(\Omega+\frac{1}{2}\omega_0\right)t\right]$$

代入上式，得

$$\begin{cases}\left(\Omega+\dfrac{1}{2}\omega_0+\omega\right)A+\omega' B=0\\[2ex] \left(\Omega-\dfrac{1}{2}\omega_0+\omega\right)B+\omega' A=0\end{cases}$$

$$\begin{cases}\omega=\dfrac{\mu H_0}{\hbar}\\[2ex] \omega'=\dfrac{\mu H}{\hbar}\end{cases}$$

$$\begin{vmatrix} \Omega+\frac{1}{2}\omega_0+\omega & \omega' \\ \omega' & \Omega-\frac{1}{2}\omega_0-\omega \end{vmatrix}=0$$

所以

$$\Omega_{1,2}=\pm\sqrt{\omega'^2+\left(\frac{1}{2}\omega_0+\omega\right)^2}$$

$$\psi(t)=\left(A_1\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Omega t}+A_2\mathrm{e}^{\mathrm{i}\Omega t}\right)\exp\left(-\mathrm{i}\frac{\omega_0}{2}t\right)\alpha+\left(B_1\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Omega t}+B_2\mathrm{e}^{\mathrm{i}\Omega t}\right)\exp\left(\mathrm{i}\frac{\omega_0}{2}t\right)\beta$$

式中

$$B_{1,2}=-A_{1,2}\frac{\Omega_{1,2}+(\omega+\omega_0/2)}{\omega'}$$

$t=0$时，$\psi=\beta$. 所以

$$B_1+B_2=1,\qquad A_1+A_2=0$$

$$A_1=\frac{\omega'}{2\Omega},\qquad A_2=-\frac{\omega'}{2\Omega}$$

$$B_1=\frac{-\left[\Omega+(\omega+\omega_0/2)\right]}{2\Omega},\qquad B_2=\frac{(\omega+\omega_0/2)-\Omega}{2\Omega}$$

系统能量 $E=\langle\psi|H|\psi\rangle$

$$\psi(t)=-\frac{\omega'}{\Omega}\mathrm{i}\sin\Omega t\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t/2}\alpha+\left[-\cos\Omega t+\mathrm{i}\frac{(\omega+\omega_0/2)}{\Omega}\sin\Omega t\right]\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t/2}\beta$$

$$H=-\mu\begin{pmatrix} H_0 & H\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t} \\ H\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t} & -H_0 \end{pmatrix}$$

$$E=-\mu\left[-H_0\cos^2\Omega t+\frac{\omega'^2 H_0-(\omega+\omega_0/2)^2 H_0-2\omega' H(\omega+\omega_0/2)}{\Omega^2}\sin^2\Omega t\right]$$

$$=\hbar\omega\frac{(\omega+\omega_0/2)^2+\omega'^2\cos 2\Omega t}{(\omega+\omega_0/2)^2+\omega'^2}+2\hbar\omega'\frac{\omega'(\omega+\omega_0/2)}{(\omega+\omega_0/2)^2+\omega'^2}\sin^2 2\Omega t$$

能量随t变化. 所以系统能量不守恒. 就自旋系统来看，它并不是孤立系统.

解法二　$\Delta E_0=\hbar\omega_0=2\mu H_0$，$\mu H_0=(1/2)\hbar\omega_0$. 又假设$\mu H=\hbar\omega$，系统 Hamilton 量为

$$H=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{H}=-\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{H}=-\mu\begin{pmatrix} H_0 & H\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t} \\ H\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t} & -H_0 \end{pmatrix}=-\hbar\begin{pmatrix} \frac{1}{2}\omega_0 & w\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t} \\ \omega\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t} & -\frac{1}{2}\omega_2 \end{pmatrix}$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=H\psi$$

得

$$\begin{cases} \mathrm{i}\dot{a} = -\dfrac{1}{2}\omega_0 a - \omega \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t} b \\ \mathrm{i}\dot{b} = -\omega \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t} a + \dfrac{1}{2}\omega_0 b \end{cases}$$

$$a(0) = 0, \qquad b(0) = 1$$

利用 Laplace 变换方法，得

$$\begin{cases} \mathrm{i}p\bar{a}(p) = -\dfrac{1}{2}\omega_0 \bar{a}(p) - \omega \bar{b}(p + \mathrm{i}\omega_0) \\ \mathrm{i}p\bar{b}(p) = -\omega \bar{a}(p - \mathrm{i}\omega_0) + \dfrac{1}{2}\omega_0 \bar{b}(p) \end{cases}$$

式中，以 $\bar{f}(p)$ 表示 $f(t)$ 的 Laplace 变换.

由上两式解得

$$\bar{a}(p) = \frac{\mathrm{i}\omega}{\Omega} \frac{\Omega}{(p + \mathrm{i}\omega_0/2)^2 + \Omega^2}$$

$$\bar{b}(p) = \frac{\mathrm{i}p + \dfrac{3}{2}\omega_0}{\omega} \bar{a}(p - \mathrm{i}\omega_0) = \frac{p - \dfrac{3}{2}\mathrm{i}\omega_0}{(p - \mathrm{i}\omega_0/2)^2 + \Omega^2}$$

$$= \frac{p - \mathrm{i}\omega_0/2}{(p - \mathrm{i}\omega_0/2)^2 + \Omega^2} - \frac{\mathrm{i}\omega_0}{\Omega} \frac{\Omega}{(p - \mathrm{i}\omega_0/2)^2 + \Omega^2}$$

式中，$\Omega^2 = \omega^2 + \omega_0{}^2$. 得

$$a(t) = \mathrm{i}\frac{\omega}{\Omega} \sin \Omega t \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t/2}$$

$$b(t) = \left(\cos \Omega t - \mathrm{i}\frac{\omega_0}{\Omega} \sin \Omega t \right) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t/2}$$

所以

$$E(t) = \langle \psi | H | \psi \rangle$$

$$= -\hbar \left(a^*(t), b^*(t) \right) \begin{pmatrix} \dfrac{\omega_0}{2} & \omega \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t} \\ \omega \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t} & -\dfrac{\omega_0}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2}\hbar\omega_0 \left[\cos^2 \Omega t + \frac{1}{\Omega^2} \left(\omega_0^2 + 3\omega^2 \right) \sin^2 \Omega t \right]$$

考虑到以 $t = 0$ 时刻 $|-1/2\rangle$ 态的能量值为零点，所以应在 $E(t)$ 表达式中减去 $(1/2)\hbar\omega_0$. 又

$$c = \left\langle +\frac{1}{2} \middle| \mu_x + \mathrm{i}\mu_y \middle| -\frac{1}{2} \right\rangle = \mu(1,\ 0) \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 2\mu$$

所以

$$\Omega^2 = \omega^2 + \omega_0^2 = \left(\mu H / \hbar \right)^2 + \omega_0^2 = c^2 H^2 / 4\hbar^2 + \omega_0^2$$

最后得

$$E(t)=\frac{1}{2}\hbar\omega_0\left(\cos^2\Omega t+\frac{\Omega^2+2\omega^2}{\Omega^2}\sin^2\Omega t\right)-\frac{1}{2}\hbar\omega_0$$

$$=\frac{\omega^2}{\Omega^2}\hbar\omega_0\sin^2\Omega t$$

$$=\frac{c^2H^2}{c^2H^2+4\hbar^2\omega_0^2}\hbar\omega_0\sin^2\left(\sqrt{\omega_0^2+c^2H^2/4\hbar^2 t}\right)$$

4.94　中子束相继穿过两个方向不同磁场时，自旋态的演化

题 4.94　一束速度为 v 的中子穿过区域(I)这里磁场 $\boldsymbol{B}=B_1\boldsymbol{e}_z$ 到达区域(II)(这里磁场 $\boldsymbol{B}=B_2\boldsymbol{e}_x$). 在区域(I)中，中子束完全沿 $+z$ 方向极化. (1) 假定一给定的粒子在 $t=0$ 时刻穿过区域(I)到区域(II)，$t>0$ 时该粒子的自旋波函数是什么？(2) 粒子束被观察在 $+x$，$+y$ 和 $+z$ 方向的成分各是多少？(3) 作为实际的事件，为使上述描述有效，(I)和(II)之间的转换必须多快？

解　(1) 只考虑自旋波函数，则相应的 Schrödinger 方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|x\rangle=H|x\rangle$$

$$H=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}=-\mu_n B_2\sigma_x$$

式中，$\mu_{\mathrm{n}}=-1.9103\mu_N$ 为中子反常磁矩，$\mu_N=\dfrac{e\hbar}{2m_p c}$ 为核磁子，m_{p} 为质子质量. 因此

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|x\rangle=\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mu_n B_2\sigma_x|x\rangle\equiv-\mathrm{i}\omega_2\sigma_x|x\rangle$$

设

$$|x\rangle=\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$$

则

$$\begin{cases}\dot{a}=-\mathrm{i}\omega_2 b\\ \dot{b}=-\mathrm{i}\omega_2 a\end{cases}\qquad \text{初始条件}\begin{cases}a(0)=1\\ b(0)=0\end{cases}$$

由此解得

$$|x\rangle=\begin{pmatrix}\cos(\omega_2 t)\\ -\mathrm{i}\sin(\omega_2 t)\end{pmatrix},\qquad \omega_2=\frac{|\mu_N|B_2}{\hbar},\qquad t>0$$

(2) 自旋在 $|x\rangle$ 态中的平均，也即中子的极化矢量为

$$\boldsymbol{P}=\langle x|\boldsymbol{\sigma}|x\rangle=(0,-\sin 2\omega_2 t,\cos 2\omega_2 t)$$

可见，在区域 II 中，中子自旋是在 $y-z$ 平面内以 $2\omega_2$ 频率绕 x 轴正向旋转着.

(3) 为使(1)和(2)中的描述有效，从(I)到(II)的过渡所花的时间必须满足

$$t\ll\frac{2\pi}{\omega_2}=\frac{\hbar}{|\mu_n|B_2}$$

取 $B_2 \sim 10^3 Gs$，可得

$$t \ll 0.7\mu s$$

若已知入射中子的动能，就可由此计算出这个磁场过渡区域的宽度上限.

4.95　$\left(\mu^+e^-\right)$原子在外磁场中 Hamilton 量中各项的意义

题 4.95　(μ^+e^-)原子(处于 $n=1$，$l=0$ 态)在外磁场中的 Hamilton 量是

$$H = a\boldsymbol{S}_\mu \cdot \boldsymbol{S}_e + \frac{|e|}{m_e c}\boldsymbol{S}_e \cdot \boldsymbol{B} - \frac{|e|}{m_\mu c}\boldsymbol{S}_\mu \cdot \boldsymbol{B}$$

(1)各项的物理意义是什么？在和外场相互作用中哪项占主导地位？(2)选 z 轴沿 $\boldsymbol{B}$，用记号 (F, M_F)，其中 $\boldsymbol{F} = \boldsymbol{S}_\mu + \boldsymbol{S}_e$. 证明(1，+1)是 H 的本征态并给出其本征值. (3)用射频场可引起向态(0，0)的跃迁. 定性描述怎样通过观察衰变 $\mu^+ \to e^+\nu_e\nu_\mu$ 去探测到这个跃迁的出现.

解　(1) H 中的第一项是 μ 子与电子间的相互作用，后两项分别表示 μ 和 e 同外场 $\boldsymbol{B}$ 的磁相互作用. 其中 $\frac{|e|}{m_e c}\boldsymbol{S}_e \cdot \boldsymbol{B}$ 占主导地位，因为 $m_e \approx \frac{m_\mu}{200}$.

(2)
$$\boldsymbol{F} = \boldsymbol{S}_\mu + \boldsymbol{S}_e$$

$$H = \frac{1}{2}a\left[\boldsymbol{F}^2 - \boldsymbol{S}_\mu^2 - \boldsymbol{S}_e^2\right] + \frac{eB}{m_e c}S_{ez} - \frac{eB}{m_\mu c}S_{\mu z}$$

而态

$$(1,\ 1) = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_e \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_\mu$$

所以

$$H(1,\ 1) = \left\{\frac{1}{2}a\hbar^2\left(2 - 2\cdot\frac{3}{4}\right) + \frac{e\hbar}{2m_e c}B - \frac{e\hbar}{2m_\mu c}B\right\}(1,\ 1)$$

$$= \left(\frac{1}{4}a\hbar^2 + \frac{e\hbar}{2m_e c}B - \frac{e\hbar}{2m_\mu c}B\right)(1,\ 1)$$

所以，(1, 1)是 H 的本征态且本征值为

$$\frac{1}{4}a\hbar^2 + \frac{e\hbar}{2m_e c}B - \frac{e\hbar}{2m_\mu c}\boldsymbol{B}$$

(3) 衰变 $\mu^+ \to e^+\nu_e\nu_\mu$ 是通过正电子湮灭 $e^+e^- \to 2\gamma$ 的观察而观察到的. 对于(1, 1)态，e^+e^- 系统的总角动量为 1，因而不能衰变成 2γ (该系统的总角动量是 0. 对于(0, 0)态，e^+e^- 系统的总角动量为 0，因而可以衰变成 2γ. 所以，探测到 $e^+e^- \to 2\gamma$，也即探测到(μ^+e^-)系统在(0, 0)态下进行的衰变 $\mu^+ \to e^+\nu_e\nu_\mu$，也就观察到了(1, 1)→(0, 0)的跃迁.

第5章　带电粒子在电磁场中运动问题

5.1　速度算符及各分量间的对易关系

题 5.1　质量为m，电荷为q的非相对论性粒子，在电磁场中运动，Hamilton 量算符为

$$H=\frac{1}{2m}(\boldsymbol{p}-q\boldsymbol{A})^2+q\varphi$$

式中，$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$和$\varphi(\boldsymbol{r},t)$分别是电磁场的矢势和标势，$\boldsymbol{p}=-\mathrm{i}\hbar\nabla$是正则动量算符. 定义速度算符

$$\boldsymbol{v}=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{r},H]$$

求v的具体表达式及它的各分量之间的对易关系，并给出$[v_\alpha,x_\beta]$的值.

解

$$\boldsymbol{v}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{r},H]=\frac{1}{2\mathrm{i}\hbar m}\left[\boldsymbol{r},(\boldsymbol{p}-q\boldsymbol{A})^2\right]$$

由于$\boldsymbol{r}$与$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$对易，且$[x_\alpha,p_\beta]=\mathrm{i}\hbar\delta_{\alpha\beta}$，有

$$\boldsymbol{v}=\frac{1}{m}(\boldsymbol{p}-q\boldsymbol{A})$$

另外，利用

$$[\boldsymbol{p},F(\boldsymbol{r})]=-\mathrm{i}\hbar\nabla F(\boldsymbol{r})$$

可有

$$\begin{aligned}[v_\alpha,v_\beta]&=-\frac{q}{m^2}\left([p_\alpha,A_\beta]+[A_\alpha,p_\beta]\right)=\frac{\mathrm{i}\hbar q}{m^2}\left(\frac{\partial A_\beta}{\partial x_\alpha}-\frac{\partial A_\alpha}{\partial x_\beta}\right)\\&=\frac{\mathrm{i}\hbar q}{m^2}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}(\nabla\times\boldsymbol{A})_\gamma=\frac{\mathrm{i}\hbar q}{m^2}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}B_\gamma\end{aligned}$$

或者

$$\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{v}=\mathrm{i}\hbar\frac{q}{m^2}\boldsymbol{B}\tag{1}$$

利用式(1)，容易证明

$$[\boldsymbol{v},\boldsymbol{v}^2]=\mathrm{i}\hbar\frac{q}{m^2}(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}-\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v})$$

$$[v_\alpha,x_\beta]=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{m}\delta_{\alpha\beta}$$

5.2　$\dfrac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}$和$\dfrac{\mathrm{d}\boldsymbol{L}}{\mathrm{d}t}$

题 5.2　质量为 m，电荷为 q 的非相对性粒子，在磁场 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$ 中运动，定义机械角动量算符

$$\boldsymbol{L}=m\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{v}$$

式中，$\boldsymbol{v}$ 为速度算符，计算$\dfrac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}$和$\dfrac{\mathrm{d}\boldsymbol{L}}{\mathrm{d}t}$.

解　Hamilton 量算符为

$$H=\frac{1}{2m}(\boldsymbol{p}-q\boldsymbol{A})^2=\frac{1}{2}m\boldsymbol{v}^2$$

利用

$$\left[\boldsymbol{v},\boldsymbol{v}^2\right]=\mathrm{i}\hbar\frac{q}{m^2}\left(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}-\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v}\right)$$

有

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\boldsymbol{v},H\right]=\frac{q}{2m}(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}-\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v}) \tag{1}$$

因为

$$\boldsymbol{L}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{r}\times m\boldsymbol{v}-m\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{r})$$

所以

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{L}}{\mathrm{d}t}=\frac{m}{2}\left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\times\boldsymbol{v}+\boldsymbol{r}\times\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}-\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}\times\boldsymbol{r}-\boldsymbol{v}\times\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\right)$$

利用式(1)和$\dfrac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}=\boldsymbol{v}$，有

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{L}}{\mathrm{d}t}=\frac{q}{4}\left[\boldsymbol{r}\times\left(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}\right)-\boldsymbol{r}\times\left(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v}\right)-\left(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}\right)\times\boldsymbol{r}+\left(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v}\right)\times\boldsymbol{r}\right]$$

令$\boldsymbol{F}=\dfrac{q}{2}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{B}-\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v})$，则有

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{L}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{F}-\boldsymbol{F}\times\boldsymbol{r}\right)$$

5.3　自由电子在外磁场中的 Hamilton 量

题 5.3　在非相对论情况下，自由电子的磁矩为 $\boldsymbol{\mu}_s$，处于恒定的均匀外磁场中，问：(1) 系统的 Hamilton 量形式如何（设 $\boldsymbol{B}=B_z\boldsymbol{e}_z$）？(2) 如果在 y 方向再加一个磁场 B_y，则系统的 Hamilton 量形式又如何？(3) 设改为一般磁场，确定算符$\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{\mu}_s$的形式.

解　(1) 系统的 Hamilton 量为

$$H=\frac{1}{2m}(\boldsymbol{p}+e\boldsymbol{A})^2-\boldsymbol{\mu}_s\cdot\boldsymbol{B}$$

式中，$\boldsymbol{\mu}_s=-\frac{e\hbar}{2m}\boldsymbol{\sigma}=-\frac{e}{m}\boldsymbol{s}$. 因为 $\boldsymbol{B}=B_z\boldsymbol{e}_z$，可取规范 $\boldsymbol{A}=-B_zy\boldsymbol{e}_x$，则有

$$H=\frac{1}{2m}(p_x-eB_zy)^2+\frac{1}{2m}\left(p_y^2+p_z^2\right)+\frac{e\hbar}{2m}B_z\sigma_z$$

(2) 在本问中，可取 $\boldsymbol{A}=-\left(B_zy\boldsymbol{e}_x+B_yx\boldsymbol{e}_z\right)$，于是有

$$\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}=B_y\boldsymbol{e}_y+B_z\boldsymbol{e}_z$$

$$H=\frac{1}{2m}(p_x-eB_zy)^2+\frac{1}{2m}p_y^2+\frac{1}{2m}\left(P_z-eB_yx\right)^2+\frac{e\hbar}{2m}\left(B_y\sigma_y+B_z\sigma_z\right)$$

(3) 在一般情况下

$$H=\frac{1}{2m}(\boldsymbol{p}+e\boldsymbol{A})^2-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}$$

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\mu}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{\mu},H]=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left(\frac{e\hbar}{2m}\right)^2\left[\sigma_\alpha\boldsymbol{e}_\alpha,\sigma_\beta B_\beta\right]$$

$$=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left(\frac{e\hbar}{2m}\right)^2\boldsymbol{e}_\alpha B_\beta\left[\sigma_\alpha,\sigma_\beta\right]$$

$$=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left(\frac{e\hbar}{2m}\right)^2 2\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\boldsymbol{e}_\alpha B_\beta\sigma_\gamma=\frac{e}{m}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{\mu}$$

5.4 带电粒子在均匀磁场中运动的轨道中心算符

题 5.4 质量为 μ，电荷为 q 的粒子，在沿着 z 轴方向的均匀磁场的作用下，在 $x\,y$ 平面上运动，定义轨道中心算符

$$x_0=x+\frac{1}{\omega}v_y,\qquad y_0=y+\frac{1}{\omega}v_x$$

式中，$\omega=qB/\mu$，说明 x_0,y_0 的经典意义，并证明它们是运动常数.

解 在经典力学中，粒子受到 Lorentz 力的作用，将作匀速圆周运动. 设轨道中心为 $\boldsymbol{r}_0(x_0,y_0)$，则轨道半径为 $|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0|$，角速度和速度分别为

$$\boldsymbol{\omega}=(0,0,-\omega),\qquad \boldsymbol{v}=\boldsymbol{\omega}\times(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)$$

因此

$$v_x=\omega_y(z-z_0)-\omega_z(y-y_0)=\omega(y-y_0)$$
$$v_y=\omega_z(x-x_0)-\omega_x(z-z_0)=-\omega(x-x_0)$$

将 v 换成算符，即得轨道中心算符，ω 的构造式可由 Lorentz 力等于向心力得出. 由于

$$\left[x,v_x\right]=\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu},\quad \left[y,v_y\right]=\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu},\quad \left[x,v_y\right]=\left[y,v_x\right]=0,\quad \left[v_x,v_y\right]=\mathrm{i}\hbar\frac{q}{\mu^2}B_z=\frac{\mathrm{i}\hbar\omega}{\mu}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{v}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{v},H]=\frac{q}{2\mu}(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}-\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v})$$

因此

$$[x_0, y_0] = \frac{1}{\omega}[v_y, y] - \frac{1}{\omega}[x, v_x] - \frac{1}{\omega^2}[v_y, v_x] = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu\omega}$$

$$\frac{\mathrm{d}x_0}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} + \frac{1}{\omega}\frac{\mathrm{d}v_y}{\mathrm{d}t} = v_x + \frac{q}{2\mu\omega}\left((\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})_y - (\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v})_y\right)$$

$$= v_x + \frac{1}{B}(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})_y = v_x - v_x = 0$$

$$\frac{\mathrm{d}y_0}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} - \frac{1}{\omega}\cdot\frac{\mathrm{d}v_x}{\mathrm{d}t} = v_y - \frac{1}{B}(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})_x = v_x - v_y = 0$$

由此从以上三式可知，轨道中心算符，x_0，y_0为运动常数(守恒量)，这与经典力学一致；x_0与y_0不对易，不能同时取确定值. 由不确定性关系

$$\Delta A\cdot\Delta B \geqslant \frac{1}{2}\left|\overline{[A,B]}\right|$$

可知

$$\Delta x_0\cdot\Delta y_0 = \frac{\hbar}{2\mu|\omega|} = \frac{\hbar}{2|q|B}$$

在经典力学中，轨道中心当然是可以精确确定的.

5.5　带电粒子在均匀磁场中运动的轨道中心算符和轨道半径的本征值谱

题 5.5　求均匀磁场$\boldsymbol{B}(0,0,B)$中运动的带电为q粒子，其在xy平面作圆周运动时，轨道中心算符$\boldsymbol{r}_0^2$和轨道半径$\rho^2 = |\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0|^2 = \frac{1}{\omega^2}\left(v_x^2+v_y^2\right)$的本征值谱.

解　利用题 5.4 结果可得下述对易关系

$$\left[H, \boldsymbol{r}_0^2\right] = \left[H, \rho^2\right] = 0, \qquad \left[\boldsymbol{r}_0^2, \rho^2\right] = 0$$

由于

$$\rho^2 = \frac{v_x^2}{\omega^2} + \frac{v_y^2}{\omega^2}, \qquad \left[v_x, v_y\right] = \frac{\mathrm{i}\hbar Bq}{\mu^2}$$

令

$$Q = \frac{\mu v_x}{\sqrt{\hbar B|q|}}, \qquad p = \frac{\mu v_y}{\sqrt{\hbar B|q|}}$$

则

$$[Q, p] = \begin{cases} \mathrm{i}, & q>0 \\ -\mathrm{i}, & q<0 \end{cases}$$

且有

$$\rho^2 = a^2\left(Q^2+p^2\right), \qquad a^2 = \frac{\hbar}{B|q|}$$

解出ρ^2的本征值为

$$\rho_n^2 = a^2(2n+1), \qquad n = 0,1,2,\cdots$$

同样的，由

$$r_0^2 = x_0^2 + y_0^2, \qquad [x_0, y_0] = -\frac{i\hbar}{qB}$$

有 r_0^2 的本征值为

$$\left(r_0^2\right)_k = a^2(2k+1), \qquad k = 0,1,2,\cdots$$

由于

$$\rho^2 = \frac{2}{\mu\omega^2}H_t, \qquad r_0^2 = \frac{2}{\mu\omega^2}H_t - \frac{2}{\mu\omega_1}L_z$$

式中

$$H_t = H - \frac{p_z^2}{2\mu}, \qquad \omega_1 = -\frac{q}{|q|}\omega$$

则有

$$k = n + \frac{q}{|q|}m$$

5.6 电荷密度和电流密度算符

题 5.6 已知质量为 m、电荷为 q 的粒子处于态 $\psi(r)$ 时，其电荷密度和电流密度分别为 $\rho(r) = q\psi^*(r)\psi(r)$, $j(r) = -\frac{i\hbar q}{2m}\left[\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right]$. 问如何引入电荷密度和电流密度算符？解释这两个算符的物理意义，并证明它们的平均值就是这里的表达式.

解 在量子力学中，“带电粒子”是当作点电荷对待的，因此，当粒子位置是 $\boldsymbol{r}$ 时，$\boldsymbol{r}'$ 处的电荷密度为

$$\rho(\boldsymbol{r}') = q\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')$$

此即定义为电荷密度算符，若粒子处于 $\psi(\boldsymbol{r})$ 所描述的状态，则粒子在 $\boldsymbol{r}$ 附近 $\mathrm{d}\tau$ 体积元中出现的概率为 $\psi^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\tau$，由此造成 $\boldsymbol{r}'$ 处的平均电荷密度为

$$\left\langle\rho(\boldsymbol{r}')\right\rangle = \int\psi^*(\boldsymbol{r})q\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\tau = q\psi^*(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}') = \rho(\boldsymbol{r}')$$

在经典物理学中，电流密度 $\boldsymbol{j}$ 为

$$\boldsymbol{j} = \rho\boldsymbol{v} = \frac{1}{m}\rho\boldsymbol{p}$$

换成量子力学算符，并使其成为 Hermite 算符，即得

$$\boldsymbol{j} = \frac{1}{2m}(\rho\boldsymbol{p} + \boldsymbol{p}\rho) = \frac{q}{2m}\left[\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')\boldsymbol{p} + \boldsymbol{p}\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')\right]$$

当粒子处于 $\psi(\boldsymbol{r})$ 状态，$\boldsymbol{r}'$ 处的平均电流密度为

$$\left\langle\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}')\right\rangle = \frac{q}{2m}\int\psi^*(\boldsymbol{r})\left[\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')\boldsymbol{p} + \boldsymbol{p}\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')\right]\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\tau$$

$$= -\frac{i\hbar q}{2m}\int \psi^*(\boldsymbol{r})\left[\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\nabla + \nabla\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\right]\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\tau$$

$$= -\frac{i\hbar q}{2m}\left[\psi^*(\boldsymbol{r}')\nabla'\psi(\boldsymbol{r}') - \psi(\boldsymbol{r}')\nabla'\psi^*(\boldsymbol{r}')\right]$$

5.7　带电粒子在均匀磁场及三维各向同性谐振子势场中的能谱

题 5.7　设带电粒子在均匀磁场 $\boldsymbol{B}$ 及三维各向同性谐振子场 $V(r)=\frac{1}{2}\mu\omega_0^2 r^2$ 中运动，求能谱公式.

解　在直角坐标系中求解，取 $\boldsymbol{B}=B\boldsymbol{e}_z$；矢势 $\boldsymbol{A}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r})=\frac{1}{2}(-By\boldsymbol{e}_x+Bx\boldsymbol{e}_y)$，为对称规范，则体系的 Hamilton 算符为

$$H=\frac{1}{2\mu}\left[\left(p_x+\frac{qB}{2}y\right)^2+\left(p_y-\frac{qB}{2}x\right)^2+p_z^2\right]+\frac{1}{2}\mu\omega_0^2x^2$$

$$=\frac{p^2}{2\mu}-\frac{qB}{2\mu}L_z+\frac{q^2B^2}{8\mu}(x^2+y^2)+\frac{1}{2}\mu\omega^2r^2$$

$$=H_1+H_2-\omega L_z$$

式中

$$H_1=\frac{p_z^2}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega_0^2z^2,\qquad H_2=\frac{1}{2\mu}(p_x^2+p_y^2)+\frac{1}{2}\mu(\omega^2+\omega_0^2)(x^2+y^2),\qquad \omega=\frac{qB}{2\mu}$$

H_1 为沿 z 轴方向运动的一维谐振子的 Hamilton 量，其本征值为

$$E_k=\left(k+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0,\qquad k=0,1,2,\cdots$$

H_2 为 xy 平面上的二维各向同性谐振子的 Hamilton 量，其本征值为

$$E_{n,m}=(2n+1+|m|)\hbar\omega',\qquad n=0,1,2,\cdots\ \to m=0,\pm1,\pm2,\cdots$$

$$\omega'=(\omega^2+\omega_0^2)^{1/2}$$

L_z 的本征值为 $m\hbar$，$m=0,\pm1,\pm2,\cdots$

由于 $\{H_1,H_2,L_z\}$ 相互独立，相互对易，它们构成了体系的一个力学量完全集，故体系能谱为

$$E_{k,n,m}=(k+1/2)\hbar\omega_0+(2n+1+|m|)\hbar\omega'-m\hbar\omega$$

5.8　限制在圆周上的带电粒子处于磁场中时的能级

题 5.8　一个质量为 m、电荷为 q 的粒子被束缚在半径为 R 的圆周上运动，讨论下述几种情况的能级：(1) 粒子的运动是非相对论的；(2) 在与圆周垂直的方向上有一个均匀的磁场 $\boldsymbol{B}$；(3) 穿过圆面的磁通量与(2)相同，但磁通被束缚在半径为 $b(b<R)$ 的螺线管内；

(4) 在圆面上有一个极强的电场 $\boldsymbol{E}$ 存在 $\left(q|E| \gg \dfrac{\hbar^2}{\mu R^2}\right)$.

解 (1) 体系的 Hamilton 量可写为

$$H = \frac{1}{2I} L_z^2, \qquad I = mR^2$$

相应的本征值、本征态为

$$E_n = \frac{n^2\hbar^2}{2mR^2}, \quad \psi_n(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}n\theta}, \qquad n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$$

(2) **解法一** 在直角坐标系中求解，取 $\boldsymbol{B} = B\boldsymbol{e}_z$ 和 $\boldsymbol{A} = \frac{1}{2}\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{r} = -\frac{1}{2}By\boldsymbol{e}_x + \frac{1}{2}Bx\boldsymbol{e}_y$，则有

$$H = \frac{1}{2m}(\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A})^2 = \frac{1}{2mR^2} L_z^2 - \frac{qB}{2m} L_z + \frac{q^2B^2}{8m} R^2$$

$$= \frac{1}{2mR^2}\left(L_z - \frac{qBR^2}{2}\right)^2$$

进一步得

$$E_n = \frac{1}{2mR^2}\left(n\hbar - \frac{q\Phi}{2\pi}\right)^2, \qquad n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots, \qquad \Phi = \pi BR^2$$

相应的本征态为

$$\psi_n(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}n\theta}$$

解法二 粒子在圆周上运动，可取 $\boldsymbol{A} = \frac{Br}{2}\boldsymbol{e}_\theta$，则体系的 Schrödinger 方程为

$$\frac{1}{2m}(\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A})^2\psi = E\psi$$

作替换 $\psi = \psi' \exp\left(\mathrm{i}\frac{q}{\hbar}\int_{r=R}^{x} \boldsymbol{A} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{x}\right)$，可有

$$\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\psi' = E\psi'$$

由于粒子被束缚在 $r = R$ 的圆上，所以

$$\psi(\theta) = \psi'(\theta)\exp\left[\mathrm{i}\frac{q}{\hbar}\int_{r=R}^{x} \boldsymbol{A} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{x}\right] \propto \psi'(\theta)\exp\left[\mathrm{i}\frac{q}{\hbar}RA(R)\theta\right]$$

采用柱坐标系，有

$$\frac{1}{2m}\left(-\frac{\mathrm{i}\hbar}{R} \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\right)^2 \psi'(\theta) = E\psi'(\theta)$$

所以

$$\psi'(\theta) \sim \mathrm{e}^{\mathrm{i}c_1\theta}, \qquad c_1\text{为常数}$$

$$\psi(\theta) \sim \exp\left\{\mathrm{i}\left[c_1 + \frac{q}{\hbar}RA(R)\right]\theta\right\}$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2mR^2} c_1^2$$

由周期性条件$\psi(\theta) = \psi(\theta + 2\pi)$，可得

$$\left[c_1 + \frac{qRA(R)}{\hbar}\right] \times 2\pi = 2n\pi, \qquad n \text{ 为整数}$$

所以

$$c_1 = n - \frac{qR}{\hbar} A(R) = n - \frac{qR}{\hbar} \cdot \frac{BR}{2} = n - \frac{qBR^2}{2\hbar}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2mR^2}\left(n - \frac{qBR^2}{2\hbar}\right)^2 = \frac{\hbar^2}{2mR^2}\left(n - \frac{q\Phi}{2\pi\hbar}\right)^2$$

$$n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots, \qquad \Phi \text{为磁通量}$$

(3) 磁场被限制在螺线管内，在管外(包括粒子运动的圆环上)磁场为零，但矢势 $\boldsymbol{A}$ 不为零，$\boldsymbol{A}$ 可取为

$$A_\theta = \frac{\Phi}{2\pi R}, \qquad A_\rho = 0, \qquad A_z = 0$$

体系的 Hamilton 量可写为

$$H = \frac{1}{2m}(P_\theta - qA_\theta) = \frac{1}{2mR^2}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\theta} - qA_\theta R\right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2mR^2}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\mathrm{i}q\Phi}{2\pi\hbar}\right)^2$$

能量本征态方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2mR^2}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\mathrm{i}q\Phi}{2\pi\hbar}\right)^2 \psi(\theta) = E\psi(\theta)$$

作规范变换$\psi(\theta) \to \psi(\theta)$，则

$$\Psi(\theta) = \psi(\theta)\exp\left(-\frac{\mathrm{i}qx(\theta)}{\hbar}\right) = \psi(\theta)\exp\left(-\frac{\mathrm{i}q\Phi\theta}{2\pi\hbar}\right)$$

式中，$x(\theta) = \dfrac{\Phi\theta}{2\pi}$. 则$\psi(\theta)$满足下列方程

$$-\frac{\hbar^2}{2mR^2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\psi(\theta) = E\psi(\theta)$$

其解为

$$\psi(\theta) \sim \mathrm{e}^{\mathrm{i}n'\theta} \text{ 且 } E = n'^2\hbar^2 / 2mR^2$$

而

$$\psi(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left(\mathrm{i}n'\theta + \mathrm{i}\frac{q\Phi\theta}{2\pi\hbar}\right)$$

由周期性条件$\psi(\theta + 2\pi) = \psi(\theta)$，可得

$$n' + \frac{q\Phi}{2\pi\hbar} = n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$$

因此

$$E_n = \frac{n'^2\hbar^2}{2mR^2} = \frac{\hbar^2}{2mR^2}\left(n - \frac{q\Phi}{2\pi\hbar}\right)^2, \qquad n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$$

(4) 在静电场作用下，定态 Schrödinger 方程为

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2mR^2}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\theta^2}-qRE\cos\theta\right)\psi=\varepsilon\psi$$

若电场很强，$\psi(\theta)$ 只有在 θ 很小处不为零，故可做近似 $\cos\theta=1-\frac{1}{2}\theta^2$，代入上式，从而得到定态 Schrödinger 方程为

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2mR^2}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\theta^2}+\frac{1}{2}qRE\theta^2\right)\psi=\left(\varepsilon+qRE\right)\psi$$

有

$$\varepsilon=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega-qER,\qquad \omega=(qE/mR)^{1/2}$$

5.9 磁通量量子化

题 5.9 采用柱面坐标 (ρ,φ,z)，设磁场 $\boldsymbol{B}$ 仅存在于很小的柱形区域 $\rho<a$ 内，通量为 $\varPhi$，$\rho>a$ 处无磁场. 令 $a\to 0$，但保持通量 $\varPhi$ 不变. (1) 证明矢势可以表示为

$$\boldsymbol{A}=\nabla f,\qquad f=\frac{1}{2\pi}\varPhi\varphi \tag{1}$$

(2) 讨论机械角动量 $L_z=\mu(\boldsymbol{r}\times v)_z$ 的本征值, 导出磁通量量子化.

解 (1) 当矢势 $\boldsymbol{A}$ 取为式(1)时，在 $\rho\neq 0$ 处，显然有

$$\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}=\nabla\times\nabla f=0$$

梯度算符的柱坐标表示式为

$$\nabla=\hat{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}+\hat{\varphi}\frac{1}{\rho}\cdot\frac{\partial}{\partial\varphi}+\hat{z}\frac{\partial}{\partial z}$$

$\hat{\rho},\hat{\varphi},\hat{z}$ 分别为 ρ,φ,z 方向的单位矢量. 由式(1)，得到

$$\boldsymbol{A}=\frac{\Phi}{2\pi\rho}\hat{\varphi}$$

对于任何一个垂直于 z 轴的圆形截面，均有

$$\oiint\boldsymbol{B}\cdot ds=\oiint(\nabla\times\boldsymbol{A})\cdot\mathrm{d}s=\oint\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\frac{1}{2\pi}\varPhi\oint\frac{\hat{\varphi}}{\rho}\cdot\rho\mathrm{d}\varphi\hat{\varphi}=\varPhi$$

$\varPhi$ 为磁通量. 可见表示式(1)是正确的.

(2) 位置矢量 $\boldsymbol{r}$ 的柱坐标表示式为

$$\boldsymbol{r}=\rho\hat{\rho}+z\hat{z}$$

因此

$$\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{A}=\frac{1}{2\pi}\varPhi\left(\hat{\rho}\times\hat{\varphi}+\frac{z}{\rho}\hat{z}\times\hat{\varphi}\right)=\frac{1}{2\pi}\varPhi\left(\hat{z}-\frac{z}{\rho}\hat{\rho}\right)$$

机械角动量的 z 分量为

r

$$L_z = \mu(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{v})_z = \left[\boldsymbol{r}\times\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\right]_z = L_z - \frac{q}{c}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{A})_z = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{q}{2\pi c}\Phi$$

只需要波函数满足周期性条件

$$\psi(\rho,\varphi,z) = \psi(\rho,\varphi+2\pi,z)$$

即可保证 L_z 为 Hermite 算符，从而求得 L_z 的本征值为

$$L_z = m\hbar - \frac{q}{2\pi c}\Phi, \qquad m = 0,\pm1,\pm2,\cdots \tag{2}$$

但如何选择 $\rho\to0$ 处，$\psi=0$，因 $\rho\neq0$ 处磁场为 0，粒子的运动应该不受场的影响，L_z 的本征值谱应和 L_z 的相同，由此可知道式(2)中第二项为 $\hbar$ 的整数倍，即

$$\frac{q\Phi}{2\pi\hbar c} = n = 0,\pm1,\pm2,\cdots$$

这就是磁通量的量子化.

5.10　对称规范与不对称规范

题 5.10　沿着 z 轴的均匀磁场 $\boldsymbol{B}(0,0,B)$ 可选择规范为

对称规范　$\boldsymbol{A} = \frac{1}{2}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r} = \left(-\frac{B}{2}y, \frac{B}{2}x, 0\right)$

不对称规范　$\boldsymbol{A}_1 = (-By,0,0)$,　$\boldsymbol{A}_2 = (0,Bx,0)$

证明 (1) $\boldsymbol{A}$ 规范下的波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$ 变换到 $\boldsymbol{A}_1,\boldsymbol{A}_2$ 规范下就是

$$\psi_1(\boldsymbol{r}) = \psi(\boldsymbol{r})\exp\left[-\frac{\mathrm{i}qB}{2\hbar c}xy\right], \qquad \psi_2(\boldsymbol{r}) = \psi(\boldsymbol{r})\exp\left[\frac{\mathrm{i}qB}{2\hbar c}xy\right]$$

(2) 若 $\psi(\boldsymbol{r})$ 是 p_x 的本征态，则 $\psi_1(\boldsymbol{r})$ 是 $p_x + \frac{qB}{2\hbar c}y$ 的本征态

证明 (1)　电磁场具有规范不变性，即在下述变换

$$\boldsymbol{A}\to\boldsymbol{A}_i = \boldsymbol{A} + \nabla f_i(\boldsymbol{r},t), \qquad \varphi\to\varphi_i = \varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}f_i(\boldsymbol{r},t)$$

此时 $\boldsymbol{E}$ 与 $\boldsymbol{B}$ 保持不变，若在量力力学中进一步要求 Schrödinger 方程具有规范不变性，则

$$\psi\to\psi_i = \psi\exp\left[\frac{\mathrm{i}q}{\hbar c}f_i(\boldsymbol{r},t)\right]$$

不难看出，对称与不对称规范之间相当于作了下述规范变换

$$\boldsymbol{A}\to\boldsymbol{A}_i = \boldsymbol{A} + \nabla f_i$$

式中

$$f_1 = -\frac{B}{2}xy, \qquad f_2 = \frac{B}{2}xy$$

所以

$$\psi_1(\boldsymbol{r}) = \psi(\boldsymbol{r})\exp\left[-\frac{\mathrm{i}qB}{2\hbar c}xy\right], \qquad \psi_2(\boldsymbol{r}) = \psi(\boldsymbol{r})\exp\left[\frac{\mathrm{i}qB}{2\hbar c}xy\right]$$

(2) 若 $p_x\psi(\boldsymbol{r}) = p_x\psi(\boldsymbol{r})$，则有

$$p_x\psi_1(\boldsymbol{r})=\left(p_x-\frac{qB}{2c}y\right)\psi_1(\boldsymbol{r})$$

可有

$$\left(p_x+\frac{qB}{2c}y\right)\psi_1(\boldsymbol{r})=p_x\psi_1(\boldsymbol{r})$$

即$\psi_1(\boldsymbol{r})$是$p_x+\dfrac{qB}{2c}y$的本征态.

5.11 Pauli 提出的全面地反映电子在电磁场中的运动的 Hamilton 量

题 5.11 对于电磁场中的电子，Pauli 提出的 Hamilton 量的形式为

$$H=\frac{1}{2\mu}[\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{p}+e\boldsymbol{A})]^2-e\varphi \tag{1}$$

试说明式(1)全面地反映电子在电磁场中运动

解 $\left[\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\boldsymbol{p}+e\boldsymbol{A}\right)\right]^2=\sigma_\alpha\sigma_\beta v_\alpha v_\beta\mu^2=\mu^2\left(\delta_{\alpha\beta}+\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_\gamma\right)v_\alpha v_\beta=\mu^2\boldsymbol{v}^2+\mathrm{i}\mu^2\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{v}\right)$

因为$\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{v}=\mathrm{i}\hbar\dfrac{-e}{\mu^2}\boldsymbol{B}$，所以有

$$H=\frac{1}{2\mu}(\boldsymbol{p}+e\boldsymbol{A})^2+\frac{e\hbar}{2\mu}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}-e\varphi$$

$$=\frac{1}{2\mu}(\boldsymbol{p}+e\boldsymbol{A})^2-\boldsymbol{\mu}_s\cdot\boldsymbol{B}-e\varphi$$

式中

$$\boldsymbol{\mu}_s=-\frac{e\hbar}{2\mu}\boldsymbol{\sigma}$$

为自旋磁矩，$-\boldsymbol{\mu}_s\cdot\boldsymbol{B}$一项代表电子自旋磁矩和磁场的相互作用. 故式(1)较为全面的反映了电子在电磁场中的运动.

5.12 带电粒子受均匀电场作用时的含时 Schrödinger 方程

题 5.12 电荷为q、质量为m的粒子受到均匀静电场$\boldsymbol{E}$的作用. (1) 写出这个系统的含时 Schrödinger 方程. (2) 证明当粒子处于任意态$\psi(\boldsymbol{r},t)$时，坐标算符的期望值满足牛顿第二定律. (3) 可以证明，这一结果在还有一个均匀静磁场存在的情况下也是正确的. 这一结论在质谱仪，粒子加速器等仪器的设计中有用吗？试解释之.

解 (1)

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi-q\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{r}\psi$$

(2)

$$\frac{\mathrm{d}\langle\boldsymbol{r}\rangle}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[\boldsymbol{r},H]}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{\left[\boldsymbol{r},\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}-q\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{r}\right]}=\frac{\langle\boldsymbol{p}\rangle}{m}$$

$$\frac{\mathrm{d}\langle\boldsymbol{p}\rangle}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[\boldsymbol{p},H]}=\nabla\left(q\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{r}\right)=q\boldsymbol{E}$$

所以

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\langle \boldsymbol{r}\rangle = q\boldsymbol{E}$$

(3) 这一结果使我们在计算仪器中带电粒子的运动轨迹时，可以直接用经典力学加以处理.

5.13　处于均匀磁场中无自旋带电粒子的能级

题 5.13　一个处于磁场 $\boldsymbol{B} = \nabla\times\boldsymbol{A}$ 中的无自旋带电粒子的 Hamilton 量为

$$H = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\right)^2$$

式中，$p = (p_x, p_y, p_z)$ 是粒子位置 $\boldsymbol{r}$ 的共轭动量. 设 $A = -B_0 y\hat{e}_x$，对应着一个均匀磁场 $B = B_0\hat{e}_z$. (1) 证明 p_x 和 p_z 是运动恒量. (2) 求该体系的能极.

解　该带电粒子的 Hamilton 量为

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_x + \frac{eB_0}{c}y\right)^2 + \frac{1}{2m}p_y^2 + \frac{1}{2m}p_z^2$$

(1) 由于 H 中不显含 x 和 z，根据量子力学基本对易关系

$$\left[x_i, p_j\right] = i\hbar\varepsilon_{ijk}, \qquad \left[p_i, p_j\right] = 0$$

容易看出

$$\left[p_x, H\right] = 0, \qquad \left[p_z, H\right] = 0$$

这就证明了 p_x, p_z 是运动恒量.

(2) 根据(1)，可以取 $\{H, p_x, p_z\}$ 作为力学量完全集，相应的本征函数可表成(注意此处及下面的 p_x, p_z 已是常数而非算符)

$$\psi(x,y,z) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_x x + p_z z)/\hbar}\phi(y)$$

其中 $\phi(y)$ 满足方程

$$\frac{1}{2m}\left[\left(p_x + \frac{eB_0}{c}y\right)^2 - \hbar^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2} + p_z^2\right]\phi(y) = E\phi(y)$$

即

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2\phi}{\mathrm{d}y^2} + \frac{m}{2}\left(\frac{eB_0}{mc}\right)^2\left(y + \frac{cp_x}{eB_0}\right)^2\phi = \left(E - \frac{p_z^2}{2m}\right)\phi$$

这是平衡点位于 $y_0 = -cp_x/eB_0$，自然频率为 $\omega = eB_0/mc$ 的一维谐振子所满足的能量本征方程. 根据谐振子的结果，可知能量本征值由下式确定

$$E - \frac{p_z^2}{2m} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\frac{eB_0}{mc}, \qquad n = 0,1,2,\cdots$$

于是，该体系能级为

$$E_n = \frac{p_z^2}{2m} + \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\frac{eB_0}{mc}, \qquad n = 0,1,2,\cdots$$

5.14　带电粒子在恒定相互垂直电磁场中运动

题 5.14　一个质量为 m、电荷为 q 的点粒子在恒定的相互垂直的磁场 $\boldsymbol{B}=B_0\hat{z}$ 和电场 $\boldsymbol{E}=E_0\hat{x}$ 中运动. (1) 解出整个能谱. (2) 求在零动量状态中速度 V 的期待值.

解　(1) 取规范使 $\boldsymbol{A}=B_0x\hat{y}$, $\varphi=-E_0x$，则

$$H=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{P}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+q\varphi=\frac{1}{2m}\left[P_x^2+\left(P_y-\frac{q}{c}B_0x\right)^2+P_z^2\right]-qEx$$

因 H 中不含有 y 和 z，故 P_y、P_z 与 H 对易，为恒量，在式中可以直接用本征值代替. 将 Hamilton 量理为

$$H=\frac{1}{2m}P_x^2+\frac{q^2B_0^2}{2mc^2}\left(x-\frac{cP_y}{qB_0}-\frac{c^2mE_0}{qB_0}\right)^2+\frac{1}{2m}P_z^2-\frac{mc^2E_0^2}{2B_0}-\frac{cP_yE_0}{B_0}$$

$$=\frac{1}{2m}P_\xi^2+\frac{m}{2}\omega^2\xi^2+\frac{1}{2m}P_z^2-\frac{mc^2E_0^2}{2B_0}-\frac{cP_yE_0}{B_0}$$

式中，$P_\xi=P_x$，$\xi=\left(x-\dfrac{cP_y}{qB_0}-\dfrac{mc^2E_0}{qB_0}\right)$ 为一对新的共轭变量，$\omega=\dfrac{qB_0}{mc}$，将 H 的表达式同一维谐振子的情形作一比较，可得出 H 的本征值为

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega+\frac{1}{2m}P_z^2-\frac{mc^2E_0^2}{2B_0}-\frac{cP_yE_0}{B_0}$$

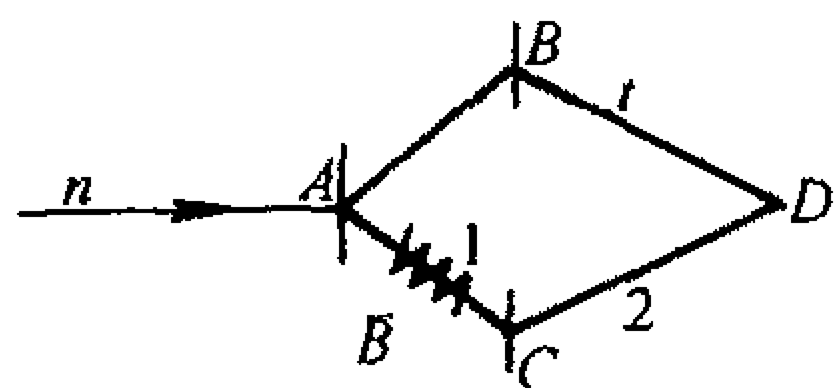
由于其中含有 P_x 和 P_y，因此简并度是无穷的.

(2) 按题意，零动量状态是指 P_y 和 P_z 的本征值为零，P_x 的期待值为零的状态. 由速度的定义，$\boldsymbol{V}=\dfrac{1}{m}\boldsymbol{P}_{机械}=\dfrac{1}{m}\left(\boldsymbol{P}-\dfrac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)$，所求 $\boldsymbol{V}$ 期待值

$$\langle\boldsymbol{V}\rangle=\left\langle\boldsymbol{P}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right\rangle=-\frac{q}{mc}\langle\boldsymbol{A}\rangle=-\frac{qB_0}{mc}\langle x\rangle\hat{y}$$

$$=-\frac{qB_0}{mc}\left(\frac{c\langle P_y\rangle}{qB_0}+\frac{mc^2E_0}{qB_0^2}+\langle\xi\rangle\right)\hat{y}$$

$$=-\frac{cE_0}{B_0}\hat{y}$$



题图 5. 15

5.15　中子的旋量干涉

题 5.15　一单色中子束($\lambda=0.1445\text{nm}$)在干涉仪的 A 点发生 Bragg 反射分成两束，然后(经过另一次反射)又汇交于点

D. 其中一束穿过一磁场强度为 $\boldsymbol{B}$ 的横向磁场区域. 经过的距离为 l(题图 5.15). 假定从 A 到 D 的两条路径除磁场有无外完全一样. 在中子极化方向平行或反平行于磁场情况下，找出 D 点强度依赖于 $\boldsymbol{B}$，l，及中子波长的明显表达式.

解　此题属于旋量干涉问题，在磁场区域内，对于不带电荷的中子，有

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2-\mu\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}\right)\psi=E\psi$$

设 $\boldsymbol{B}$ 为均匀恒定的，则有

$$\psi(\boldsymbol{r},t_1)=\exp\left[-\mathrm{i}\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta\right)(t_1-t_0)\right]\psi(t_0)\,,\qquad t_0\text{ 为进入磁场，}t_1\text{ 为出磁场时刻}$$

设 $\psi(t)\equiv\psi(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{s},t)$　$\psi(\boldsymbol{r},t),\psi(\boldsymbol{s},t)$ 分别表示 ψ 空间部分与自旋部分，则有

$$\psi(\boldsymbol{r},t_1)=\exp\left[-\mathrm{i}\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta\right)(t_1-t_0)\right]\psi(\boldsymbol{r},t_0)\,,\qquad\text{自由粒子波函数}$$

$$\psi(\boldsymbol{s},t_1)=\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mu\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}(t_1-t_0)\right]\psi(\boldsymbol{s},t_0)$$

干涉是由于磁场使自旋波函数改变引起的.

由 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 为自由粒子波函数，可得

$$t_1-t_0=\frac{l}{v}=\frac{ml}{\hbar k}$$

$$\psi(\boldsymbol{s},t_1)=\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mu\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}\frac{ml}{\hbar k}\right]\psi(\boldsymbol{s},t_0)=\exp\left[\mathrm{i}\frac{2\pi\mu ml\lambda}{\hbar^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}\right]\psi(\boldsymbol{s},t_0)$$

所以在 D 点产生的干涉强度正比于

$$\left|\psi_D^{(1)}(\boldsymbol{r},t)\psi_D^{(1)}(\boldsymbol{s},t)+\psi_D^{(2)}(\boldsymbol{r},t)\psi_D^{(2)}(\boldsymbol{s},t)\right|^2$$

$$\propto\left|\psi_D^{(1)}(\boldsymbol{s},t)+\psi_D^{(2)}(\boldsymbol{s},t)\right|^2=\left|\psi^{(2)}(\boldsymbol{s},t_0)+\psi^{(2)}(\boldsymbol{s},t_1)\right|^2$$

由

$$\exp\left[\mathrm{i}\frac{2\pi\mu ml\lambda}{\hbar^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}\right]=\cos\frac{2\pi\mu ml\lambda}{\hbar^2}\boldsymbol{B}+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\frac{\boldsymbol{B}}{B}\sin\frac{2\pi\mu ml\lambda}{\hbar^2}\boldsymbol{B}$$

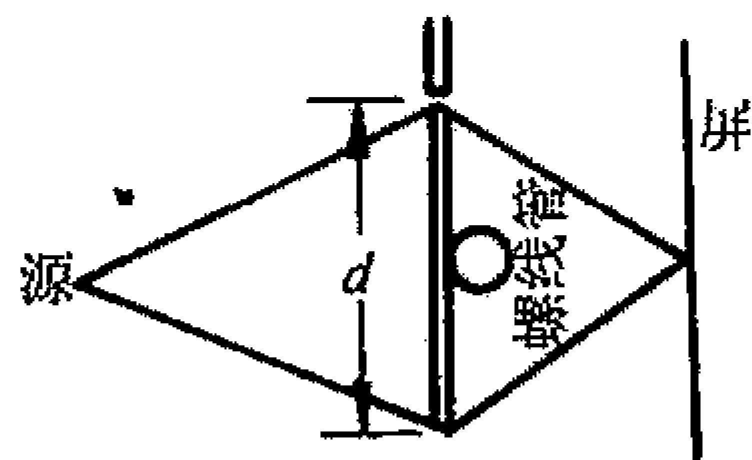
及 $\boldsymbol{\sigma}$ 与 $\boldsymbol{B}$ 同向或反向假定，有

$$\left|\psi^{(2)}(\boldsymbol{s},t_0)+\psi^{(2)}(\boldsymbol{s},t_1)\right|^2=\left(1+\cos\frac{2\pi\mu ml\lambda}{h^2}B\right)^2+\sin^2\frac{2\pi\mu ml\lambda}{h^2}B=4\cos^2\frac{\pi\mu ml\lambda B}{h^2}$$

所以 D 点干涉强度 $\propto\cos^2\dfrac{\pi\mu ml\lambda B}{h^2}$，$\mu$ 为中子内禀磁矩，

$\mu<0$.

5.16　Aharonov-Bohm 效应



题图 5.16

题 5.16　考虑一个无限长的螺线管. 其中通有电流 I，结果在螺线管内产生了一个均匀恒定的磁场. 假设在螺线管外

的区域中，电荷为e、质量为m的粒子的运动可以用 Schrödinger 方程描述. 假定对于$I\equiv 0$，方程的解由下式给出

$$\psi(\boldsymbol{x},t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}E_0t}\psi(\boldsymbol{x})$$

(1) 对$I\neq 0$情况写出并解螺线管外区域中的 Schrödinger 方程. (2) 考虑一个为上述粒子准备的双缝衍射实验(题图 5.16 所示)，假定两缝间距d远大于螺线管直径. 计算由于$I\neq 0$的螺线管的存在而使衍射图像在屏上产生的移动ΔS. 假定$l\gg\Delta S$.（提示 $\psi(\boldsymbol{x},t)=\psi_0(\boldsymbol{x},t)\psi_A(\boldsymbol{x})$，其中$\left(\nabla-\mathrm{i}\frac{e}{c}A(\boldsymbol{x})\right)\cdot\psi_A(\boldsymbol{x})=0$).

解 (1) 作替换$\boldsymbol{P}\to\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}$，即可由无电磁场情况下的 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi_0(\boldsymbol{x},t)=\left[\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2+V(\boldsymbol{x})\right]\psi_0(\boldsymbol{x},t),\qquad \hbar=1$$

得到有电磁场存在的 Schrödinger 方程(最小电磁耦合原理)

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x},t)=\left[\frac{1}{2m}\left(-\mathrm{i}\nabla-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+V(\boldsymbol{x})\right]\psi_0(\boldsymbol{x},t)\tag{1}$$

(电磁量用 Gauss 制且$\hbar=1$，其中$\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}=0$)作变换，令

$$\psi(\boldsymbol{x},t)=\psi_1(\boldsymbol{x},t)\exp\left(\mathrm{i}\int^x\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right),\qquad \hbar=1$$

则由(1)可得

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi_1(\boldsymbol{x},t)=\left[\frac{1}{2m}\boldsymbol{P}^2+V(\boldsymbol{x})\right]\psi_1(\boldsymbol{x},t)$$

由题意可知

$$\psi_1(\boldsymbol{x},t)=\psi_0(\boldsymbol{x},t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}E_0t}\psi(\boldsymbol{x})$$

$$\psi(\boldsymbol{x},t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}E_0t}\psi(\boldsymbol{x})\exp\left(\mathrm{i}\int^x\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right)$$

(2) 由题设条件可知属 Aharonov-Bohm 效应问题.

未加电流时，对屏上任一点，其概率幅f为

$$f=f_++f_-$$

式中，f_+、f_-分别表示上下孔的贡献部分.

加上电流后

$$f_+'=\exp\left(\mathrm{i}\int_{c_+}^x\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right)f_+$$

$$f_-'=\exp\left(\mathrm{i}\int_{c_-}^x\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right)f_-$$

式中，c_+、c_-分别表示积分路径是由在螺线管上方、下方路径构成的. 所以

$$f'=f_+'+f_-'=\exp\left(\mathrm{i}\int_{c_+}^x\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right)f_++\exp\left(\mathrm{i}\int_{c_-}^x\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right)f_-\sim\exp\left(\mathrm{i}\oint\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right)f_-+f_+$$

上式最后一项已抽出公共的相位常数，这不影响对干涉图形的讨论. 其中$\oint\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}$是沿任

一包围螺线管的回路的环积分(沿逆时针方向)

$$\oint \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{x}=\frac{e\Phi}{c}, \qquad \Phi \text{ 为磁通量}$$

所以引入通电螺线管后相当于下孔对于屏上一点的概率振幅贡献一个位相因子 $\frac{e\Phi}{c}$.

仿光学中杨氏干涉公式推导，可得衍射图像移动 ΔS. 由 $l \gg d$ 及 $l \gg \Delta S$，有

$$\Delta S\cdot\frac{d}{l}\cdot k=\frac{e\Phi}{c}, \qquad k \text{ 为中子数}$$

$$\Delta S=\frac{el\Phi}{cdk}=\frac{el\Phi}{cd\sqrt{2m_n E_0}}, \qquad \hbar=1$$

上式为非相对论的，m_n 为中子质量.

5.17 将 Bohr-Sommerfeld 关系推广应用到有电磁场存在的情况

题 5.17 我们可以将半经典的 Bohr-Sommerfeld 关系

$$\oint \boldsymbol{p}\cdot d\boldsymbol{r}=\left(n+\frac{1}{2}\right)2\pi\hbar$$

(其中积分是沿一封闭的轨道)推广应用到有电磁场存在的情形，只需用 $\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A}/c$ 代替 $\boldsymbol{p}$. 应用这关系及关于线动量 $\boldsymbol{P}$ 的运动方程，推导一半经典电子在一磁场 $\boldsymbol{B}$ 中沿任意轨道运动时，其磁通量的量子化条件. 对于固体中的电子，这条件可用电子轨道在 k 空间的尺度 s 重新加以描述. 试找出用 $\boldsymbol{B}$ 表达的 S 的量子化条件(忽略自旋效应).

解 在电磁场存在情况下，正则动量 $\boldsymbol{P}$ 为

$$\boldsymbol{P}=\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}$$

其中 $\boldsymbol{p}$ 为机械动量.

由推广的 Bohr-Sommerfeld 条件，有

$$\oint \boldsymbol{P}\cdot d\boldsymbol{r}=\oint\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\cdot d\boldsymbol{r}=\left(n+\frac{1}{2}\right)2\pi\hbar$$

$$\oint \boldsymbol{p}\cdot d\boldsymbol{r}-\frac{e}{c}\oint \boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{r}=\left(n+\frac{1}{2}\right)2\pi\hbar$$

由 $\nabla\times\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}$，$\oint \boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{r}=\int_s(\nabla\times\boldsymbol{A})\cdot d\boldsymbol{S}=\int_s \boldsymbol{B}\cdot d\boldsymbol{S}=\Phi$ 及电子在电磁场中运动的经典方程式 $\frac{d}{dt}\boldsymbol{p}=-\frac{e}{c}\frac{d\boldsymbol{r}}{dt}\times\boldsymbol{B}$，得

$$\boldsymbol{p}=-\frac{e}{c}\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{B}, \qquad \text{设 } \boldsymbol{B} \text{ 是恒场}$$

$$\oint \boldsymbol{p}\cdot d\boldsymbol{r}=-\oint\frac{e}{c}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{B})\cdot d\boldsymbol{r}=\int_s\frac{e}{c}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{B})\cdot d\boldsymbol{r}=2\frac{e}{c}\int_s \boldsymbol{B}\cdot d\boldsymbol{S}=2\frac{e}{c}\Phi$$

则有

$$2\frac{e}{c}\Phi-\frac{e}{c}\Phi=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\cdot(2\pi)$$

$$\Phi=\frac{2\pi c\hbar}{e}\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

又由 $p=\hbar k=-\frac{e}{c}r\times B$，得

$$\hbar\Delta k=-\frac{Be}{c}\Delta r,\qquad \Delta r=-\frac{\hbar c}{Be}\Delta k$$

所以轨道在 k 空间中占的面积 S_n 与其在位置坐标空间中的面 A_n 之间关系为

$$A_n=\left(\frac{\hbar c}{Be}\right)^2 S_n$$

$$\Phi=\int B\cdot da=\left(\frac{\hbar c}{Be}\right)^2\int B\cdot dS_n=+\left(\frac{\hbar c}{Be}\right)^2 BS_n=\frac{2\pi\hbar c}{e}\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

所以

$$S_n=\frac{2\pi Be}{\hbar c}\left(n+\frac{1}{2}\right),\qquad \text{此处只计 } S_n \text{ 大小}$$

5.18　规范变换对波函数的影响

题 5.18　写出无自旋带电粒子在磁场中的 Hamilton 量. 证明规范变换 $A(r)\to A(r)+\nabla f(r)$ 等价于波函数乘上因子 $\exp\left[-\frac{ie}{\hbar c}f(r)\right]$.这个结果的意义是什么？考虑沿 z 轴均匀磁场 H 的情况，证明能级可写成

$$E=\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{|e|\hbar}{mc}H+\frac{\hbar^2}{2m}k_z^2$$

讨论波函数的特点(提示　利用规范 $A_x=-Hy, A_y=A_z=0$).

解　Hamilton 量为

$$H=\frac{1}{2m}\left(p-\frac{e}{c}A\right)^2$$

磁场为

$$H=\nabla\times A$$

Schrödinger 方程为

$$\frac{1}{2m}\left(p-\frac{e}{c}A\right)^2\psi(r)=E\psi(r)$$

作规范变换

$$A(r)\to A'(r)=A(r)+\nabla f(r)$$

与此同时，作相应的波函数变换

$$\psi(r)\to\psi'(r)=\psi(r)\exp\left[\frac{ie}{\hbar c}f(r)\right]$$

则由于

$$\left(p-\frac{e}{c}A'\right)\psi'(r)=\exp\left[\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}f(r)\right]\left(p+\frac{e}{c}\nabla f(r)-\frac{e}{c}A'\right)\psi(r)$$

$$=\exp\left[\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}f(r)\right]\left(p-\frac{e}{c}A\right)\psi(r)$$

$$\left(p-\frac{e}{c}A'\right)^2\psi'(r)=\exp\left[\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}f(r)\right]\left(p-\frac{e}{c}A\right)^2\psi(r)$$

因此可得

$$\frac{1}{2m}\left(p-\frac{e}{c}A'\right)^2\psi'(r)=E\psi'(r)$$

这表明在规范变换 $A'=A+\nabla f$ 下，Schrödinger 方程不变，波函数仅差一相因子，系统有规范不变性. 取规范

$$A_x=-Hy,\qquad A_y=A_z=0$$

则 $H=\nabla\times A=He_x$. Hamilton 量成为

$$H=\frac{1}{2m}\left[p_y+\frac{eH}{c}y\right]^2+p_x^2+p_z^2$$

因为

$$[p_x,H]=[p_z,h]=0$$

故力学量完全集可取为(p_x,p_z,H). 相应的本征态为

$$\psi(x,y,z)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_x x+p_z z)/\hbar}\chi(y)$$

令 $cp_x/eH=-y$ 则上式化为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\chi''+\frac{1}{2}m\left(\frac{eH}{mc}\right)^2(y-y_0)^2\chi=\left(E-\frac{p_z^2}{2m}\right)\chi$$

这是一个谐振子方程，因此能级为

$$E=\frac{\hbar^2}{2m}k_z^2+\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\frac{|e|H}{mc}$$

相应波函数为

$$\psi_{p_x p_z n}(x,y,z)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_x x+p_z z)/\hbar}\chi_n(y-y_0)$$

$$\chi_n(y-y_0)\sim\exp\left[-\frac{|e|H}{2\hbar c}(y-y_0)^2\right]H_n\left(\sqrt{\frac{|e|H}{\hbar c}}(y-y_0)\right)$$

能量公式中不出现 p_x(取值范围 $-\infty\to\infty$)，故能级对 p_x 为无穷简并的，同时对 p_x 的正负方向也是简并的.

5.19　三维刚性盒中电子受一均匀磁场作用时的能级

题 5.19　设定出一个装在方盒 L^3 中的电子的能级及其简并度和相应的本征函数，电子是处在一个矢势为

$$A = H_0 x e_y$$

的电磁场中.

解 由最小电磁耦合原理，此时定态 Schrödinger 方程为

$$\frac{1}{2m}\left(p - \frac{e}{c}A\right)^2 \psi = E\psi$$

由 $A = H_0 x e_y$，可得

$$H\psi = \frac{1}{2m}\left[p_y^2 + p_z^2 + \left(p_x - H_0 x \frac{e}{c}\right)^2\right]\psi = E\psi \tag{1}$$

故可取 $\{H, p_y, p_z\}$ 作为力学量的完全集，相应的本征函数可表成

$$\psi(x) = e^{i(p_y y + p_z z)/\hbar}\psi_0(x)$$

式中，p_y, p_z 可取任一实数值.

由方程(1)及 ψ 表达式可得

$$\frac{1}{2m}\left[p_y^2 + p_z^2 + \left(p_x - H_0 x \frac{e}{c}\right)^2\right]\psi = E\psi(x)$$

或

$$\frac{1}{2m}\left[p_x^2 + \left(\frac{eH_0}{c}\right)^2\left(x - \frac{c}{eH_0}p_y\right)^2\right]\psi_0 = E\psi_0 \quad \left(E_0 + \frac{1}{2m}p_z^2 = E\right)$$

所以

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_0 + \frac{m}{2}\left(\frac{H_0 e}{mc}\right)^2 (x - x_0)^2 \psi_0 = E_0 \psi_0$$

式中，$x_0 = \dfrac{c p_y}{e H_0}$.

上式是一个一维谐振子的能量本征方程，其自然频率为 $\omega_0 = \dfrac{-H_0 e}{mc}$，平衡位置在 $x = x_0$ 处. 所以其能量本征值为

$$E_0 = (n + 1/2)\hbar\omega_0, \qquad n = 0,1,2,\cdots$$

$$E_n = \frac{p_z^2}{2m} + (n + 1/2)\hbar\frac{-H_0 e}{mc} = \frac{p_z^2}{2m} - (n + 1/2)\frac{H_0 e}{mc}\hbar, \qquad n = 0,1,2,\cdots$$

相应本征函数为

$$\psi_{n0} \sim \exp\left[\frac{eH_0}{2\hbar c}(x - x_0)^2\right] H_n\left(\sqrt{\frac{|e|H}{\hbar c}}(x - x_0)\right)$$

所以能级为

$$E = \frac{p_z^2}{2m} - (n + 1/2)\frac{H_0 e}{mc}\hbar, \qquad n = 0,1,2,\cdots$$

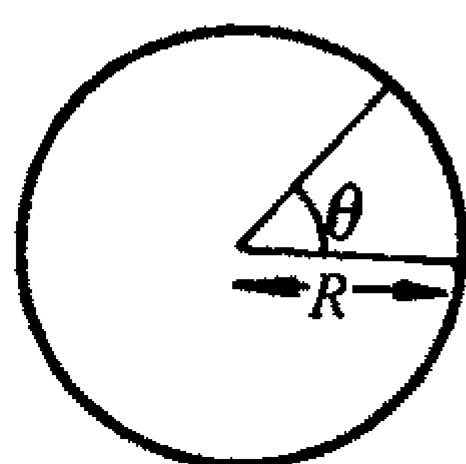
由于能级中无 p_y 项出现，且 p_y 可取任意实数值，所以能级是无限简并. 与能级相应的本征函数(定态的)为

$$\psi(x)=C_n\exp\left[\mathrm{i}\frac{p_y y+p_z z}{\hbar}+\frac{eH_0}{2\hbar c}(x-x_0)^2\right]H_n\left(\sqrt{\frac{|e|H}{\hbar c}}(x-x_0)\right)$$

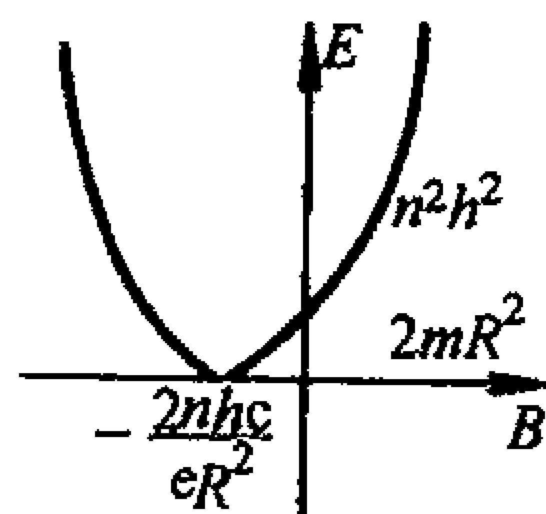
式中，C_n是归一化常数因子，$x_0=\dfrac{cp_y}{eH_0}$.

5.20　导体圆环处于磁场中，在此环中运动电子的基态与外磁场的关系

题 5.20　考虑一个由细导线组成的半径为 R 的圆环(题图 5.20)，与环面垂直的均匀恒定磁场使通过环的磁通量为 ϕ. 设想导线只有一个电子且此电子可沿环自由移动. 此电子的波函数 $\psi(\theta)$ 只是角度 θ 的函数，忽略电子自旋与外磁场及电子自身产生的磁场之间的一切相互作用. (1) 在上述近似下，此电子基态能量如何赖于外加的磁场？推导出公式并且画出结果的简图. (2) 设想起先在有磁通量 ϕ 存在条件下线环处于基态,然后缓慢地去掉磁场. 问线环中的电流是多少？(3) 假设 $R=2\text{cm},\phi=0.6\text{Gs}\cdot\text{cm}^2$，求电流是多少安培？



(a)



(b)

题图 5.20

解　(1) 由于 $\boldsymbol{B}$ 均匀且垂直于环面. 可取 $\boldsymbol{A}=-\dfrac{Br}{2}\boldsymbol{e}_\theta$，在题设条件下电子的定态 Schrödinger 方程为

$$\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{P}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\psi=E\psi\,,\qquad e\text{为电子电量}$$

作替换 $\psi=\psi'\exp\left(\mathrm{i}\dfrac{e}{c\hbar}\displaystyle\int^x\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right)$，由上方程可得

$$\frac{1}{2m}\boldsymbol{P}^2\psi'=E\psi'$$

由于题设电子被束缚在 $r=R$ 的圈上，所以

$$\psi=\psi(\theta)=\psi'\exp\left[\mathrm{i}\frac{e}{c\hbar}\int_{r=R}\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right]\propto\psi'\exp\left[\mathrm{i}\frac{e}{c\hbar}RA(R)\theta\right]$$

$$\psi'=\psi'(\theta)$$

采用柱坐标，有 $\dfrac{1}{2m}\left(-\mathrm{i}\dfrac{\hbar}{R}\dfrac{d}{d\theta}\right)^2\psi'(\theta)=E\psi'(\theta)$，所以

$$\psi'(\theta)\sim\mathrm{e}^{\mathrm{i}c_1\theta},\qquad c_1\text{为一常数}$$

$$\psi(\theta) \sim \exp\left\{ \mathrm{i}\left[c_1 + \frac{e}{c\hbar} RA(R) \right] \theta \right\}$$

且

$$E = \frac{\hbar^2}{2mR^2} c_1^2$$

由周期性边界条件 $\psi(\theta) = \psi(\theta + 2\pi)$，可得

$$\left[c_1 + \frac{eR}{c} A(R) \right] \cdot (2\pi) = 2n\pi, \qquad n \text{ 为整数}$$

所以

$$c_1 = n - \frac{eR}{c\hbar} A(R) = n + \frac{eR}{c\hbar} \cdot \frac{BR}{2} = n + \frac{eBR^2}{2c\hbar}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2mR^2}\left(n + \frac{eBR^2}{2c\hbar} \right) = \frac{\hbar^2}{2mR^2}\left(n + \frac{e\phi}{2\pi c\hbar} \right), \qquad n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$$

E_n 与外磁场 B 或 ϕ 关系是抛物线型关系(题图 5.20)

由于 n 为整数，所以基态能量为

$$E_{基态} = \frac{\hbar^2}{2mR^2}\left(n^* + \frac{eR^2B}{2c\hbar} \right)^2$$

式中，n^* 为最靠近 $-\dfrac{eR^2B}{2c\hbar}\left(或 -\dfrac{e\phi}{2\pi c\hbar} \right)$ 的整数.

(2) 在题设条件下，去掉磁场时 n 不会变，波函数变成 $\psi \sim c\mathrm{e}^{in\theta}$，此时电流密度

$$j = \frac{e\hbar}{2m\mathrm{i}}\left(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^* \right)\Big|_{r=R}$$

$$= \frac{e\hbar}{2m\mathrm{i}} (\mathrm{i}n) 2 \frac{1}{R} \psi^* \psi \boldsymbol{e}_\theta$$

$$= \frac{e\hbar n}{mR} \psi^* \psi \boldsymbol{e}_\theta$$

由 ψ 归一化条件 $\int \psi^* \psi \mathrm{d}l \cdot \mathrm{d}s_{线截面} = 1$. 令 $\psi = c\mathrm{e}^{in\theta}$，则

$$S_{线截面} \cdot 2\pi R |c|^2 = 1, \qquad |c|^2 = \left(2\pi R S_{线截面} \right)^{-1}$$

$$I = \int j \cdot \mathrm{d}s_{线截面} = \frac{ne\hbar}{mR} |c|^2 S_{线截面} = \frac{ne\hbar}{mR}\left(2\pi R S_{线截面} \right)^{-1} S_{线截面} = \frac{ne\hbar}{2\pi m R}$$

(由于线很细，认为线上同一截面中的 j 相同).

由于初始处于基态，E_n 为最小，所以 $n = -\left[\dfrac{e\phi}{2\pi c\hbar} \right]$ 或 $-\left[\dfrac{e\phi}{2\pi c\hbar} \right] - 1$ 中之一 ($[A]$ 表不大于 A 的最大整数).

对于宏观大量子数情况(本题(3))即属于这种情况，$n \approx -\dfrac{e\phi}{2\pi c\hbar}$，所以

$$I \approx \frac{e^2\phi}{4\pi^2 R^2 mc}$$

(3) 在 $R=2\text{cm}$，$\phi=0.6\text{Gs}\cdot\text{cm}^2$ 时，将上面 I 的公式化成 SI 制形式

$$I=\frac{e^2\phi}{4\pi^2R^2mc}=\frac{\left(1.6\times10^{-19}\right)^2\times0.6\times10^{-4}\times10^{-4}}{4\pi^2\times\left(2\times10^{-2}\right)^2\times0.9\times10^{-30}}\text{A}=1.1\times10^{-14}\text{A}$$

5.21　时间反演不变时，波函数的时间反演形式

题 5.21　(1) 假定非相对论量子力学在时间反演下不变，导出 Schrödinger 波函数的时间反演形式. (2) 一个自由电子，磁矩为 $\boldsymbol{\mu}$ 处于沿 z 方向的恒定外磁场中. 在电子的参照系中量子力学 Hamilton 量形式如何？设场强为 H_z. (3) 假如在 y 方向上再加上一个常磁场 H_y，试确定这时算符 $\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\mu}}{\mathrm{d}t}$ 的形式.

解　(1) $-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t)=H\psi(t)$，作变换 $t\to-t$ 后

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(-t)=H(-t)\psi(-t)$$

即

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(-t)=H^*(-t)\psi^*(-t)$$

如果 $H(-t)=H(t)$，则 Schrödinger 波动方程在时间反演下不变. 波函数的时间反演形式为 $\psi^*(-t)$.

(2) 在电子的参照系中

$$H=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{H}=-\mu_zH_z=\frac{e\hbar}{2mc}\sigma_zH_z$$

(3) 现在 $H=\frac{e\hbar}{2mc}\left(\sigma_zH_z+\sigma_yH_y\right)$

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\mu}}{\mathrm{d}t}&=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{\mu},H]=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left(\frac{e\hbar}{2mc}\right)^2[-\sigma_x\hat{x}-\sigma_y\hat{y}-\sigma_z\hat{z},\sigma_zH_z+\sigma_yH_y]\\&=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left(\frac{e\hbar}{2mc}\right)^2[\mathrm{i}\left(\sigma_yH_z-\sigma_zH_y\right)\hat{x}-\mathrm{i}\sigma_xH_z\hat{y}+\mathrm{i}\sigma_xH_y\hat{z}]\\&=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left(\frac{e\hbar}{2mc}\right)^2\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{H}=\frac{e}{2mc}\boldsymbol{H}\times\boldsymbol{\mu}\end{aligned}$$

5.22　有自旋的带电粒子在均匀磁场中低速运动时的 Hamilton 量

题 5.22　一个粒子质量为 m，电荷为 q，内禀角动量为 s（s 不必等于 $\hbar/2$）和磁偶极矩为 $\boldsymbol{\mu}=\frac{q}{2mc}gs$. 该粒子在一个均匀磁场中以小于光速 c 的速度运动(磁场为 $\boldsymbol{B}$). (1) 写出体系的 Hamilton 量$\left(\text{均匀磁场的矢量势可写成}\ \boldsymbol{A}=\frac{1}{2}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r}\right)$. (2) 从这个 Hamilton 量，推导线

动量 $\boldsymbol{P}$ 和角动量 $\boldsymbol{s}$ 的量子力学(Heisenberg)运动方程(在此非相对论近似中可略去 A^2 项). (3) 不解这些方程，给出保持螺旋度为常数的 g 常数的值(螺旋度为自旋在动量方向的投影）. (4) 下列粒子 g 常数的实际值是多少？ e, p, n, π.

解 (1) Hamilton 量为(取规范 $\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0$)

$$H=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{P}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}=\frac{1}{2m}\boldsymbol{P}^2-\frac{q}{mc}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{P}+\frac{q^2}{2mc^2}\boldsymbol{A}^2-\frac{gq}{2mc}\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{B}$$

(2) 按题设，以下计算中略去 A^2 项

$$\frac{\mathrm{d}P_i}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[P_i,H]=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[P_i,-\frac{q}{mc}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{P}-\frac{gq}{2mc}\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{B}\right]=\frac{q}{mc}(\partial_i A_j)P_j$$

$$\frac{\mathrm{d}s_i}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[s_i,H]=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[s_i,-\frac{gq}{2mc}\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{B}\right]=-\frac{gq}{2mc}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{s}$$

(3) $\boldsymbol{P}$ 和 $\boldsymbol{s}$ 对易. 可在 $\boldsymbol{P}$ ， s^2 和 s_z 的共同本征态中讨论.

螺旋度 $h=\dfrac{\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{P}}{|\boldsymbol{s}|}$ 是一个数乘算符

$$\boldsymbol{A}=\frac{1}{2}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r}=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\boldsymbol{B}\times\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{P}}$$

$$\left[h,-\frac{q}{mc}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{P}\right]=\frac{\mathrm{i}\hbar q}{2mc}\varepsilon_{ijs}\frac{s_iP_j}{|\boldsymbol{P}|}\cdot B_s$$

$$\left[h,-\frac{gq}{2mc}\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{B}\right]=-\frac{\mathrm{i}\hbar gq}{2mc}\varepsilon_{ijs}\frac{s_iP_j}{|\boldsymbol{P}|}\cdot B_s$$

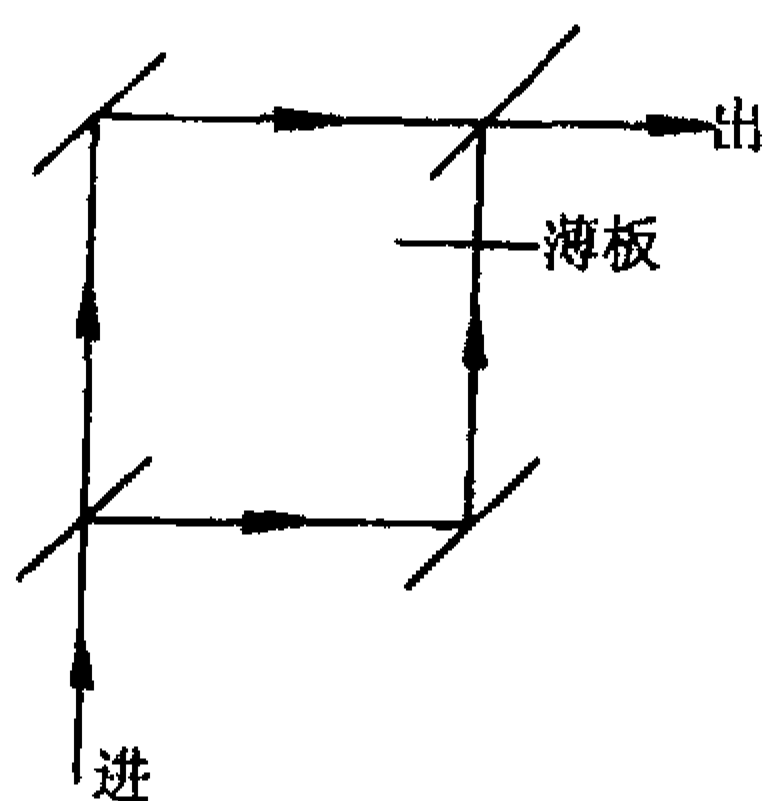
若要螺旋度为常数，即 $[h,H]=0$ ，则 g 必须为 1.

(4) 这些粒子的 g 值(实际值)如下

e	p	n	π
−2.0	5.6	−3.8	0

5.23 中子干涉问题

题 5.23 有一台中子干涉仪(题图 5.23)，其分束器和反射镜是用同一块单晶制成的. (1) 改变放在干涉仪的一臂中的薄塑料板的厚度. 可以改变两臂的相对位相，于是条纹发生移动，简要定性解释相移的起源. (2) 在一臂中垂直于中子束加上一很均匀的常磁场，这时中子所受的磁力可以忽略. 选择磁场的强度，使中子的自旋矢量恰好旋转一周，发现两中子束的相对位相改变了半周，即 π 的弧度. 用恰当的方程说明为什么是这样的.



题图 5. 23

解 (1) 当中子通过薄塑料板时，中子在塑料板中受到一个附加势的作用，因而动量发生改变，中子波的 de Broglie 波长也随之变化. 所以，中子波在相同厚度的塑料板和真空中传播时，位相的改变是不同的. 放在一臂中的薄塑料板厚

度如果改变，也就改变了(从同一束中子分出的)两束中子波通过两臂时的相对位相.

(2) 由于中子有反常磁矩，可记为 $\boldsymbol{\mu}_{\rm n}=-\mu_{\rm n}\boldsymbol{\sigma}$. Schrödinger 方程为

$$\left(\frac{P^2}{2m_{\rm n}}+\mu_{\rm n}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}\right)\psi=E\psi$$

由于磁场对中子的作用很弱，可略去中子波入射到板状磁场界面时的反射波，这时可以证明(求解上述一维方阱、两个自旋分量的 Schrödinger 方程)：射入这板状磁场(正入射)的波函数 $\psi_{入}$ 和透出板状磁场的波函数 $\psi_{出}$ 之间用如下么正变换关系相联系

$$\psi_{出}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{1}{2}\sigma\cdot\rho}\psi_{入}$$

式中 $\boldsymbol{\rho}=\omega_{\rm L}\tau\boldsymbol{e}_B$ ，$\omega_{\rm L}=\dfrac{2\mu_{\rm n}B}{\hbar}$ 是 Rameau 频率，$\tau=\dfrac{Lm_{\rm n}}{\hbar k}$ 是中子通过厚为 L 的板状磁场的时间，$\boldsymbol{e}_B$ 是 $\boldsymbol{B}$ 的单位方向矢量，k 是入射中子的波数.

假定中子进入磁场前极化在(θ,φ)方向，即极化矢量

$$\boldsymbol{P}=\langle\psi_{入}|\boldsymbol{\sigma}|\psi_{入}\rangle=\{\sin\theta\cos\varphi,\sin\theta\sin\varphi,\cos\theta\}$$

那么 $\psi_{入}$ 可由下式给出

$$\psi_{入}=\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi/2}\\ \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi/2}\end{pmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}$$

式中，θ 是同磁场方向的夹角. 选 $\boldsymbol{e}_B=\boldsymbol{e}_z$ ，则

$$\psi_{出}=\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\rho/2} & 0\\ 0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\rho/2}\end{pmatrix}\psi_{入}=\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\varphi+\rho)/2}\\ \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\varphi+\rho)/2}\end{pmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}$$

调整 B(或 L)使 $\rho=2\pi$ ，则中子极化矢量在透出磁场时已施进了一周，但这时

$$\psi_{出}=\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi/2}\\ \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi/2}\end{pmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}+\pi)}$$

即出射波只增加了 π 位相，从而和另一臂(未通过磁场)的中子波相比只使相对位相改变了半周.

5.24　处于 2p 态氢原子在外磁场中，计算 $\langle L_z\rangle$

题 5.24　(1) 一个氢原子处在 2p 态，并且是 $L_x=\hbar$ 的态. 在 $t=0$ 时，在系统上加上强度为 $|B|$、方向沿 z 轴的强磁场. 假定电子的自旋效应可以忽略，计算 L_x 的期望值随时间的变化. (2) 所加的磁场需多强才能使电子自旋效应真正被忽略？答案用标准的宏观单位表示. (3) 如果加上的磁场极弱，并假定 $t=0$ 时，$L_x=+\hbar, s_x=\dfrac{1}{2}\hbar$ 而磁场仍指向 z 轴方向. 概

述这种情形下对 L_x 的期望值随时间变化的计算过程(不需作全部计算，但各主要步骤需解释清楚).

注意　在本题中，核自旋的所有效应均可忽略.

解　(1) 题中给出的初始条件写成明确表达式是

$$\psi(\boldsymbol{r},t)\big|_{t=0}=R_{21}(\boldsymbol{r})\Theta(\theta,\varphi)$$

式中，$\Theta(\theta,\varphi)=\frac{1}{2}\left(Y_{11}+Y_{1-1}+\sqrt{2}Y_{10}\right)$ 为 $L_x=\hbar$ 本征态.

在 $t>0$ 时，系统加上了强度为 $|B|$ 的，指向 z 轴方向的强磁场，则系统的 Hamilton 量为

$$H=\frac{P^2}{2m}+\frac{eB}{2m_e c}l_z+\frac{e^2B^2}{8m_e c^2}\left(x^2+y^2\right)$$

考虑到在一般的强磁场 $B\sim10^5\text{Gs}$ 下，B^2 项可以忽略不计，所以重写 Hamilton 量为

$$H=\frac{P^2}{2m}-\frac{e^2}{r}+\frac{eB}{2m_e d}l_z$$

Schrödinger 方程为 $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=H\psi$. 方程的本征态解为

$$\begin{cases}\psi_{nlm}(\boldsymbol{r},t)=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)e^{-iE_{nlm}t/\hbar}\\ E_{nlm}=E_{nl}+\dfrac{eB}{2m_e c}m\hbar\end{cases}$$

于是可得方程的一般解为

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\sum_{nlm}a_n\psi_{nlm}(\boldsymbol{r})\exp\left[-i\frac{E_{nlm}t}{\hbar}\right]$$

考虑到初始条件，则系统随时间变化的波函数为

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=R_{21}(r)\left[\frac{1}{2}Y_{11}\exp\left(-i\frac{E_{211}t}{\hbar}\right)+\frac{1}{2}Y_{1-1}\exp\left(-i\frac{E_{21-1}t}{\hbar}\right)+\sqrt{2}Y_{10}\exp\left(-i\frac{E_{210}t}{\hbar}\right)\right]$$

于是，L_x 的期望值即为 $\langle\psi(\boldsymbol{r},t)|L_x|\psi(\boldsymbol{r},t)\rangle$. 由于 $L_x=\frac{1}{2}(L_++L_-)$，故

$$L_xY_{11}=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}Y_{10},\qquad L_xY_{1-1}=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}Y_{10},\qquad L_xY_{10}=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\left(Y_{11}+Y_{1-1}\right)$$

所以

$$L_x(t)=\langle\psi(\boldsymbol{r},t)|L_x|\psi(\boldsymbol{r},t)\rangle=\hbar\cos\frac{eB}{2m_e c}t$$

(2) 所谓强磁场下自旋效应可以不加考虑，就是指电子在磁场中附加能远大于自旋一轨道耦合作用能的情形，即

$$\frac{e\hbar}{2m_e c}B\gg\Delta E_{\text{自一轨}}\approx10^{-3}\text{eV}$$

将已知的 e，$\hbar$，m_e，c 数值代入，得

$$B\geqslant10^6\text{Gs}$$

所以，当磁场强到10^6 Gs[①]以上时，电子的自旋效应可以真正不予考虑.

(3) 当加给氢原子系统的是弱磁场时，电子的自旋效应必须考虑. 这时计算 L_x 随时间变化的期望值的主要步骤如下：

(i) 写出极弱磁场下系统的 Hamilton 量

$$H=\frac{\boldsymbol{P}^2}{2m_e}-\frac{e^2}{r}+\frac{e^2}{2m_e^2c^2r^3}(\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L})+\frac{eB}{2m_ec}J_z+\frac{eB}{2m_ec}S_z$$

这是个典型的反常效应问题. 取耦合表象. 在计算含 S_z 项的附加能时，可近似认为此表象对之是对角的.

(ii) 写出符合初始条件 $L_x=+\hbar$， $S_x=+\frac{\hbar}{2}$ 的系统随时间变化的波函数. 初始条件为

$$\psi_0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{S})=R_{21}(\boldsymbol{r})\Theta(\theta,\varphi)\varphi_s$$

式中，Θ,φ_s 分别是在 $(L^2,L_z),(S^2,S_z)$ 表象中 $L_x=\hbar$ 和 $S_x=\frac{\hbar}{2}$ 的本征波函数. 其明确表达式为

$$\psi_0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{S})=R_{21}(\boldsymbol{r})\frac{1}{2}\left(Y_{11}+Y_{1-1}+\sqrt{2}Y_{10}\right)\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha+\beta)$$

$$=\frac{R_{21}(\boldsymbol{r})}{\sqrt{2}}\left(Y_{11}\alpha+Y_{11}\beta+Y_{1-1}\alpha+Y_{1-1}\beta+\sqrt{2}Y_{10}\alpha+\sqrt{2}Y_{10}\beta\right)$$

注意

$$\phi_{j=\frac{3}{2},m=\frac{3}{2}}=Y_{11}\alpha$$

$$\phi_{\frac{3}{2}\frac{1}{2}}=\sqrt{\frac{1}{3}}Y_{11}\beta+\sqrt{\frac{2}{3}}Y_{10}\alpha,\phi_{\frac{3}{2}-\frac{1}{2}}=\sqrt{\frac{1}{3}}Y_{1-1}\alpha+\sqrt{\frac{2}{3}}Y_{10}\beta,\phi_{\frac{3}{2}-\frac{3}{2}}=Y_{1-1}\beta$$

将 ψ_0 转化为耦合表象

$$\psi_0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{S})=\frac{1}{2\sqrt{2}}R_{21}(r)\left[\phi_{\frac{3}{2}\frac{3}{2}}+\sqrt{3}\phi_{\frac{3}{2}\frac{1}{2}}+\sqrt{3}\phi_{\frac{3}{2}-\frac{1}{2}}+\phi_{\frac{3}{2}-\frac{3}{2}}\right]$$

式中 ϕ_{jm_j} 是(J^2,J_z)的本征函数. 这里能级为 E_{nljm_j}.

体系的随时间变化的波函数为

$$\psi_0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{S},t)=\frac{1}{2\sqrt{2}}R_{21}(r)\left[\phi_{\frac{3}{2},\frac{3}{2}}\exp\left(-\frac{\mathrm{i}E_{21,\frac{3}{2},\frac{3}{2}}t}{\hbar}\right)+\sqrt{3}\phi_{\frac{3}{2},\frac{1}{2}}\exp\left(-\frac{\mathrm{i}E_{21,\frac{3}{2},\frac{1}{2}}t}{\hbar}\right)\right.$$

$$\left.+\sqrt{3}\phi_{\frac{3}{2},-\frac{1}{2}}\exp\left(-\frac{\mathrm{i}E_{21,\frac{3}{2},-\frac{1}{2}}t}{\hbar}\right)+\phi_{\frac{3}{2},-\frac{3}{2}}\exp\left(-\frac{\mathrm{i}E_{21,\frac{3}{2},-\frac{3}{2}}t}{\hbar}\right)\right]$$

(iii) 直接计算 L_x 的期望值

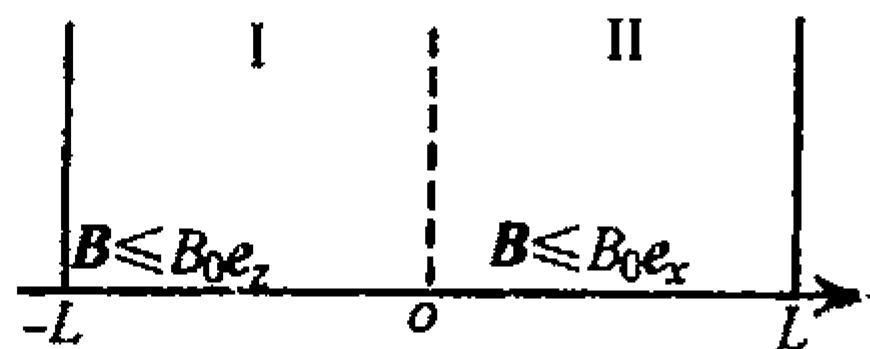
$$\langle\psi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{S},t)|\psi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{S},t)\rangle$$

---

① Gs 为磁通量密度单位，1Gs= 10^{-4}T.

5.25　不带电荷磁矩为$\boldsymbol{\mu}$粒子被约束在$(-L, L)$的无限深势阱中，在$x<0$区加磁场$B_0\boldsymbol{e}_z$，在$x>0$区加磁场$B_0\boldsymbol{e}_x$，求能量本征态及能级方程

题 5.25　考虑无电荷但自旋为$\frac{1}{2}$磁矩为$\boldsymbol{\mu}=-\frac{2\mu_0}{\hbar}\boldsymbol{s}$的粒子的一维运动. 粒子被约束在无限深方势阱中,势阱从$x=-L$延伸到$x=L$. 在I区($x<0$)有z方向的均匀磁场$B=B_0\boldsymbol{e}_z$,在II区($x>0$)有同样大小但指向x方向的均匀，磁场$\boldsymbol{B}=B_0\boldsymbol{e}_x$. $\boldsymbol{e}_x$，$\boldsymbol{e}_z$是x和z方向的单位矢量(题图 5.25). (1) 在弱场极限$B_0\ll\frac{1}{2m\mu_0}\left(\frac{\hbar}{L}\right)^2$下，用微扰论找出基态的能量和波函数(自旋和空间). (2) 现考虑B_0任意，找出在I区满足左方边条件的能量本征函数ψ_{I}的一般表达式(空间和自旋). 同理求II区满足右方边条件的能量本征函数ψ_{II}. (3) 求出决定能量本征值E的方程.



题图 5.25

解　(1) 无磁场时$H=H_0$，能量本征函数(空间)为

$$\psi_n=\sqrt{\frac{1}{L}}\sin\frac{n\pi(x+L)}{2L},\qquad n=1,2,3,\cdots$$

$$E_n=\frac{\hbar^2\pi^2}{8mL^2}n^2$$

考虑自旋，可知每个能级是二重简并的. 有磁场时$H=H_0+H'$

$$H'=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}=\mu_0\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}=\begin{cases}\mu_0B_0\sigma_z, & -L\leqslant x\leqslant 0\\ \mu_0B_0\sigma_x, & 0\leqslant x\leqslant L\\ 0, & \text{其他}\end{cases}$$

弱场时取$\mu_1=\psi_1(x)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$，$\mu_2=\psi_1(x)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$为基矢，则

$$H'_{11}=\langle\mu_1|H'|\mu_1\rangle=\mu_0B_0\int_{-L}^{0}\psi_1^*(x)\psi_1(x)\mathrm{d}x=\frac{\mu_0B_0}{2}$$

$$H'_{21}=H'_{12}=\langle\mu_1|H'|\mu_2\rangle=\mu_0B_0\int_{0}^{L}\psi_1^*(x)\psi_1(x)\mathrm{d}x=\frac{\mu_0B_0}{2}$$

$$H'_{22}=\langle\mu_2|H'|\mu_2\rangle=-\mu_0B_0\int_{-L}^{0}\psi_1^*(x)\psi_1(x)\mathrm{d}x=-\frac{\mu_0B_0}{2}$$

由$\det(H'-E^{(1)}I)=0$可得

$$\left(\frac{\mu_0B_0}{2}-E^{(1)}\right)\left(-\frac{\mu_0B_0}{2}-E^{(1)}\right)-\frac{\mu_0^2B_0^2}{4}=0$$

$$E^{(1)}=\pm\frac{1}{\sqrt{2}}\mu_0B_0$$

基态能级为

$$E_0=\frac{\pi^2\hbar^2}{8mL^2}-\frac{1}{\sqrt{2}}\mu_0 B_0$$

由 $(H'-E^{(1)}I)\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}$ 可求得基态波函数

$$\varphi_0=a\mu_1+b\mu_2=\psi_1(x)\begin{pmatrix}1-\sqrt{2}\\1\end{pmatrix}\qquad\text{(未归一)}$$

(2) I 区波函数的空间部分为

$$\psi_{\mathrm{I}k_1}\begin{cases}A\sin k_1(x+L)+B\cos k(x+L)_1, & -L\leqslant x\leqslant 0\\0, & x<-L\end{cases}$$

由波函数连续可知 $B=0$，再考虑自旋可得 I 区波函数($-L\leqslant x\leqslant 0$)

$$\begin{cases}\psi_{\mathrm{I}k_1x\downarrow}=\sin k_1(x+L)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}, & E=\dfrac{\hbar^2k_1^2}{2m}-\mu_0B_0\\[2ex]\psi_{\mathrm{I}k_1x\uparrow}=\sin k_1(x+L)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}, & E=\dfrac{\hbar^2k_1^2}{2m}+\mu_0B_0\end{cases}$$

同理，可得 II 区的能量本征函数为($0\leqslant x\leqslant L$)

$$\begin{cases}\psi_{\mathrm{II}k_2x\downarrow}=\sin k_2(x-L)\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}, & E=\dfrac{\hbar^2k_2^2}{2m}-\mu_0B_0\\[2ex]\psi_{\mathrm{II}k_2x\uparrow}=\sin k_2(x-L)\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}, & E=\dfrac{\hbar^2k_2^2}{2m}+\mu_0B_0\end{cases}$$

$x>L$ 时，波函数为零.

(3) 考虑全空间能量本征函数为

$$\psi_E=\begin{cases}A\psi_{\mathrm{I}k_1x\downarrow}+B\psi_{\mathrm{I}k_1x\uparrow}, & -L\leqslant x\leqslant 0\\C\psi_{\mathrm{II}k_2x\downarrow}+D\psi_{\mathrm{II}k_2x\uparrow}, & 0\leqslant x\leqslant L\\0, & \text{其他}\end{cases}$$

$$H\psi_E=E\psi_E$$

而

$$H\psi_E=\begin{cases}\left(\dfrac{\hbar^2k_1^2}{2m}-\mu_0B_0\right)A\psi_{\mathrm{I}k_1x\downarrow}+\left(\dfrac{\hbar^2k_1^2}{2m}+\mu_0B_0\right)B\psi_{\mathrm{I}k_1x\uparrow}, & -L<x<0\\[2ex]\left(\dfrac{\hbar^2k_2^2}{2m}-\mu_0B_0\right)C\psi_{\mathrm{II}k_2x\downarrow}+\left(\dfrac{\hbar^2k_2^2}{2m}+\mu_0B_0\right)D\psi_{\mathrm{II}k_2x\uparrow}, & 0<x<L\\[2ex]0, & \text{其他}\end{cases}$$

式中，x 的区间与前相同. 则

$$E=\frac{\hbar^2k_1^2}{2m}-\mu_0B_0=\frac{\hbar^2k_1'^2}{2m}+\mu_0B_0$$

$$=\frac{\hbar^2k_2^2}{2m}-\mu_0B_0=\frac{\hbar^2k_2'^2}{2m}+\mu_0B_0$$

所以

$$k_1 = k_2 \approx k, \qquad k_1' = k_2' = k'$$

考虑波函数在 $x=0$ 连续，可得

$$\begin{pmatrix} B\sin k'L \\ A\sin kL \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -C\sin kL - D\sin k'L \\ C\sin kL - D\sin k'L \end{pmatrix}$$

考虑波函数的导数在 $x=0$ 连续，可得

$$\begin{pmatrix} Bk'\cos k'L \\ Ak\cos kL \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Ck\cos kL + Dk'\cos k'L \\ -Ck\cos kL + Dk'\cos k'L \end{pmatrix}$$

由非零解条件得

$$\begin{vmatrix} 0 & \sin k'L & \sin kl & \sin k'L \\ \sin kL & 0 & -\sin kL & \sin k'L \\ 0 & k'\cos k'L & -k\cos kL & -k'\cos k'L \\ k\cos kL & 0 & k\cos kL & -k'\cos k'L \end{vmatrix} = 0$$

$$-\sin kL \cdot \begin{vmatrix} \sin k'L & \sin kL & \sin k'L \\ k'\cos k'L & -k\cos kL & -k'\cos k'L \\ 0 & k\cos kL & -k'\cos k'L \end{vmatrix}$$

$$-k\cos kL \cdot \begin{vmatrix} \sin k'L & \sin kL & \sin k'L \\ 0 & -\sin kL & \sin k'L \\ k'\cos k'L & -k\cos kL & -k'\cos k'L \end{vmatrix} = 0$$

$$-4kk'\sin kL \cdot \sin k'L \cdot \cos kL \cdot \cos k'L + k'\sin kL\cos k'L \cdot (-k'\sin kL \cdot \cos k'L - k\sin k'L \cdot \cos kL)$$

$$-k\sin k'L\cos kL(k'\sin kL\cos k'L + k\sin k'L\cos kL) = 0$$

$$4kk'\sin kL \cdot \sin k'L \cdot \cos kL \cdot \cos k'L$$

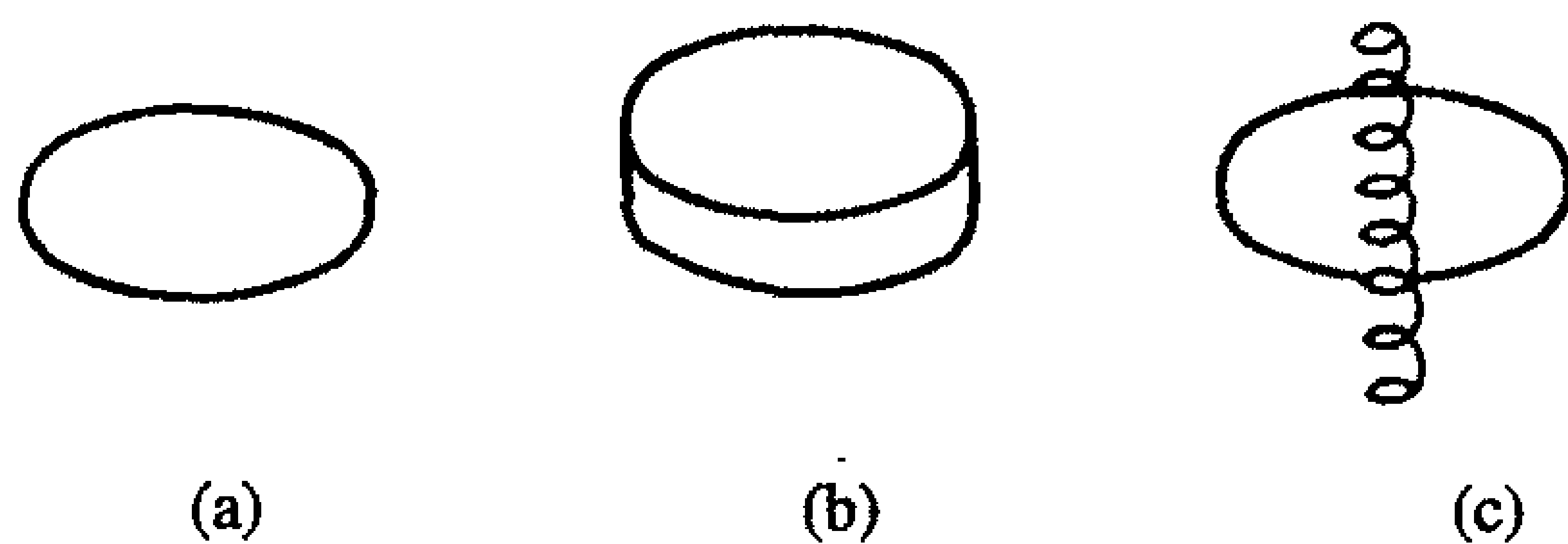
$$= (k\sin kL\cos k'L + k\sin k'L\cos kL)^2 \cdot k\sin kL\cos k'L - k'\sin k'L\cos kL = 0$$

确定能量本征值 E 的方程为

$$\begin{cases} E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu_0 B_0 = \dfrac{\hbar^2 k'^2}{2m} + \mu_0 B_0 \\ k\sin kL\cos k'L = k'\sin k'L\cos kL \end{cases}$$

5.26 带电粒子在磁通为 ϕ 的长螺线管穿过半径为 R 的双环中运动时，能级及本征函数

题 5.26 (1) 一个粒子在半径为 R 的环上做非相对论性运动时(题图 5.26(a)),其能量本征值和本征函数是什么？(2) 当上题的环变为(题图 5.26(b))双环时(每一环的半径为 R)，系统的能量本征值及本征函数是什么？(3) 设粒子电量为 q，当一只磁通为 Φ 的长螺线管穿过(1)及(2)的环中的时候(题图 5.26(c))，这两个系统的能量本征值和本征函数又变成了什么？假定系统无电磁辐射.



(a)　　(b)　　(c)

题图 5.26

解　(1)

$$\begin{cases}-\dfrac{\hbar^2}{2I}\cdot\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\theta^2}\psi(\theta)=E\psi(\theta), \qquad I=mR^2\\ \psi(\theta+2\pi)=\psi(\theta)\end{cases}$$

得

$$\begin{cases}\psi_n(\theta)=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}n\theta},\\ E_n(\theta)=\dfrac{n^2\hbar^2}{2I},\end{cases} \qquad n=0,\pm1,\pm2,\cdots$$

(2)

$$\begin{cases}-\dfrac{\hbar^2}{2I}\cdot\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\theta^2}\psi(\theta)=E\psi(\theta)\\ \psi(\theta+4\pi)=\psi(\theta)\end{cases}$$

得

$$\begin{cases}\psi_n(\theta)=\dfrac{1}{\sqrt{4\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{n}{2}\theta},\\ E_n(\theta)=\dfrac{n^2\hbar^2}{8I},\end{cases} \qquad n=0,\pm1,\pm2,\cdots$$

(3)

$$H=\frac{1}{2m}(\boldsymbol{p}-q\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}))^2=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla-\frac{\mathrm{i}q}{\hbar}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\right)^2$$

由于粒子运动区域里 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}=0$，故可取 $\boldsymbol{A}=\nabla\varphi$. 由对称性知，$\boldsymbol{A}=A_\theta\boldsymbol{e}_\theta$，$A_\theta=\mathrm{const}$.

$$\oint\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{l}=\int_0^{2\pi}A_\theta R\mathrm{d}\theta=2\pi RA_\theta=\phi$$

所以有

$$\boldsymbol{A}=\frac{\phi}{2\pi R}\boldsymbol{e}_\theta=\nabla\left(\frac{\phi}{2\pi}\theta\right),$$ 取 $\varphi=\dfrac{\phi\theta}{2\pi}$ 只引起波函数的常数相位差

$$\begin{aligned}H\psi&=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla-\frac{\mathrm{i}q\phi}{2\pi\hbar}\nabla\theta\right)^2\Phi\\&=-\frac{\hbar^2}{2m}\exp\left(\mathrm{i}\frac{q\phi}{2\pi\hbar}\theta\right)\nabla^2\left(\exp\left(-\mathrm{i}\frac{q\phi}{2\pi\hbar}\theta\right)\psi(\theta)\right)\\&=E\psi\end{aligned}$$

作变换

$$\psi'(\theta)=\exp\left(-\mathrm{i}\frac{q\phi}{2\pi\hbar}\theta\right)\psi(\theta)$$

得

$$\begin{cases}-\dfrac{\hbar^2}{2I}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\theta^2}\psi'(\theta)=E\psi'(\theta)\\ \psi'(\theta)=\exp\left(\pm\sqrt{\dfrac{2IE}{\hbar^2}}\theta\right)\end{cases}$$

对情况(1)有

$$\begin{aligned}\psi(\theta+2\pi)&=c\exp\left[\mathrm{i}\frac{q\phi}{2\pi\hbar}(\theta+2\pi)\right]\psi'(\theta+2\pi)\\&=c\exp\left[\mathrm{i}\left(\frac{q\phi}{2\pi\hbar}\pm\sqrt{\frac{2IE}{\hbar^2}}\right)(\theta+2\pi)\right]\\&=\psi(\theta)=c\exp\left[\mathrm{i}\left(\frac{q\phi}{2\pi\hbar}\pm\sqrt{\frac{2IE}{\hbar^2}}\right)\theta\right]\end{aligned}$$

所以有

$$\frac{q\phi}{2\pi\hbar}\pm\sqrt{\frac{2IE}{\hbar^2}}=n$$

得

$$\begin{cases}E_n=\dfrac{\hbar^2}{2I}\left(n-\dfrac{q\phi}{2\pi\hbar}\right)^2,\\ \psi_n(\theta)=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}n\theta},\end{cases}\qquad n=0,\pm1,\pm2,\cdots$$

同理，以情形(2)有

$$\begin{cases}E_n=\dfrac{\hbar^2}{2I}\left(\dfrac{n}{2}-\dfrac{q\phi}{2\pi\hbar}\right)^2=\dfrac{\hbar^2}{8I}\left(n-\dfrac{q\phi}{\pi\hbar}\right)^2,\\ \psi_n(\theta)=\dfrac{1}{\sqrt{4\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{n}{2}\theta},\end{cases}\qquad n=0,\pm1,\pm2,\cdots$$

第6章　定态近似问题

6.1　用微扰论计算椭球状刚性势阱中基态能量修正

题 6.1　(1) 证明在通常的定态微扰论中，如果 Hamilton 量可以写成 $H = H_0 + H'$，其中 $H_0\phi_0 = E_0\phi_0$，则能量的修正项为 $\Delta E_0 \approx \langle\phi_0|H'|\phi_0\rangle$. (2) 对于一个球形核来说，可以假定核子处于一个半径为 R 的球对称势阱中，势由

$$V_{\varepsilon p} = \begin{cases} 0, & r < R \\ \infty, & r > R \end{cases}$$

给出. 相应地，对发生微小形变的核，可以认为核子处于椭球状势阱中，势壁高仍为无限，即

$$V_{\varepsilon l} = \begin{cases} 0, & \text{在}\dfrac{x^2+y^2}{b^2}+\dfrac{z^2}{a^2}=1\text{ 之内} \\ \infty, & \text{其外} \end{cases}$$

其中 $a \approx R(1+2\beta/3), b \approx R(1-\beta/3)$，且 $\beta \ll 1$. 利用恰当的 H^1 和(1)的结果，近似地求出椭球形核相对于球对称核基态能量的变化(**提示**　作变量代换，化成球形势阱计算).

解　(1) 且不管归一化，将微扰后波函数写成

$$|\phi_0\rangle + \lambda_1|\phi_1\rangle + \cdots + \lambda_n|\phi_n\rangle + \cdots$$

$\lambda_1,\cdots,\lambda_n$ 为小量，H' 相对 H_0 来说也是小量. 在 Schrödinger 方程中

$$(H'+H_0)(|\phi_0\rangle + \lambda_1|\phi_1\rangle + \cdots + \lambda_n|\phi_n\rangle + \cdots)$$

$$= (E_0+\Delta E_0)(|\phi_0\rangle + \lambda_1|\phi_1\rangle + \cdots + \lambda_n|\phi_n\rangle + \cdots)$$

只保留一级小量，则得到

$$H'|\phi_0\rangle + H_0(\lambda_1|\phi_1\rangle + \cdots + \lambda_n|\phi_n\rangle + \cdots)$$

$$= \Delta E_0|\phi_0\rangle + E_0(\lambda_1|\phi_1\rangle + \cdots + \lambda_n|\phi_n\rangle + \cdots)$$

且左矢 $\langle\phi_0|$ 乘方程两端，利用 ϕ_i 的正交归一性，就得到 $\Delta E_0 = \langle\phi_0|H'|\phi_0\rangle$.

(2) 问题是要求解定态问题

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$$

式中

$$V = \begin{cases} 0, & \text{在}\dfrac{x^2+y^2}{b^2}+\dfrac{z^2}{a^2}=1\text{之内} \\ \infty, & \text{其外} \end{cases}$$

作变量代换，$x = \dfrac{b}{R}\xi,\ y = \dfrac{b}{R}\eta,\ z = \dfrac{a}{R}\zeta$，则原椭球边界成为 $\xi^2+\eta^2+\zeta^2 = R^2$

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{R^2}{b^2}\frac{\partial^2}{\partial \xi^2}+\frac{R^2}{b^2}\frac{\partial^2}{\partial \eta^2}+\frac{R^2}{a^2}\frac{\partial^2}{\partial \zeta^2}\right)$$

$$\approx-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial \xi^2}+\frac{\partial^2}{\partial \eta^2}+\frac{\partial^2}{\partial \zeta^2}\right)-\frac{\hbar^2\beta^2}{3m}\left(\frac{\partial^2}{\partial \xi^2}+\frac{\partial^2}{\partial \eta^2}-2\frac{\partial^2}{\partial \zeta^2}\right)$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla'^2-\frac{\hbar^2\beta^2}{3m}\left(\frac{\partial^2}{\partial \xi^2}+\frac{\partial^2}{\partial \eta^2}-2\frac{\partial^2}{\partial \zeta^2}\right)$$

由于β很小，后一项可取为微扰. 根据(1)有

$$\Delta E_0=\langle\phi_0|-\frac{\hbar^2\beta^2}{3m}\left(\frac{\partial^2}{\partial \xi^2}+\frac{\partial^2}{\partial \eta^2}-2\frac{\partial^2}{\partial \zeta^2}\right)|\phi_0\rangle$$

ϕ_0是球形势阱中的基态波函数，$\phi_0=\sqrt{\frac{2}{R}}\frac{\sin(\pi r/R)}{r}$，$r^2=\xi^2+\eta^2+\zeta^2$.

由于ϕ_0是球对称的，应有

$$\langle\phi_0|\frac{\partial^2}{\partial \xi^2}|\phi_0\rangle=\langle\phi_0|\frac{\partial^2}{\partial \eta^2}|\phi_0\rangle=\langle\phi_0|\frac{\partial^2}{\partial \zeta^2}|\phi_0\rangle$$

所以

$$\Delta E_0=0$$

6.2 微扰论计算切去一角的无限深阱中前三态的能量修正

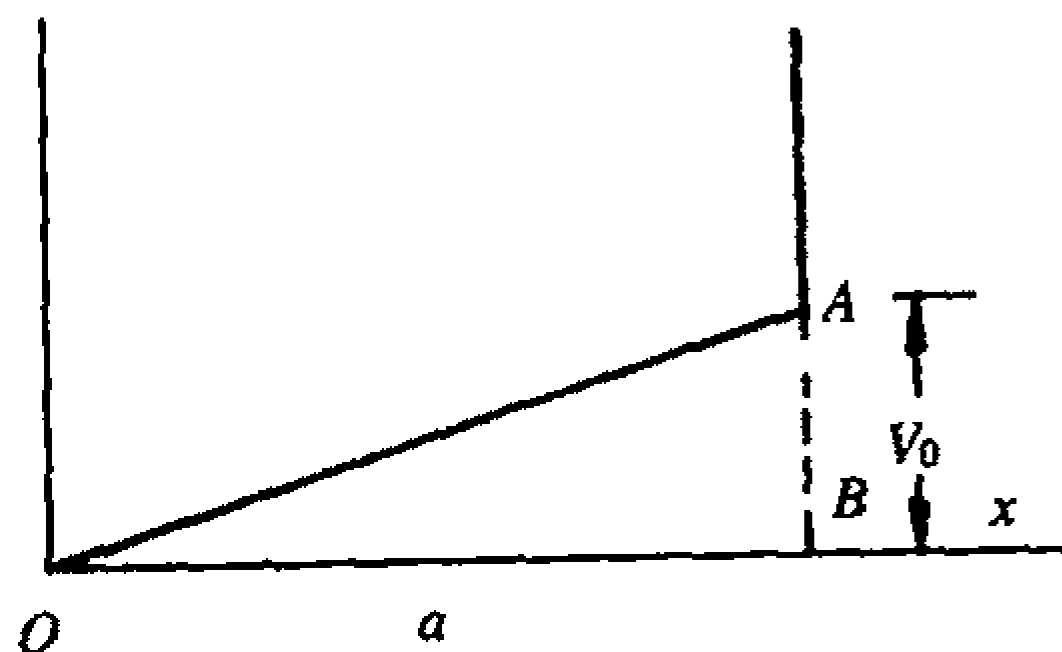
题 6.2 用一级微扰论计算宽度为a的无限深势阱的头三个态的能量，势阱的OAB部分被“切去”了(题图 6.2).

解 未受微扰的本征函数和相应的本征值为

$$\psi_1^{(0)}=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi}{a}x,\quad E_1^{(0)}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}$$

$$\psi_2^{(0)}=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{2\pi}{a}x,\quad E_2^{(0)}=\frac{2\pi^2\hbar^2}{\mu a^2}$$

$$\psi_3^{(0)}=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{3\pi}{a}x,\quad E_3^{(0)}=\frac{9\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}$$



题图 6.2

加上微扰$H'=\frac{V_0}{a}x(0\leqslant x\leqslant a)$后能量本征值的一级修正分别为

$$\left\langle\psi_1^{(0)}\left|H'\right|\psi_1^{(0)}\right\rangle=\frac{V_0}{2}$$

$$\left\langle\psi_2^{(0)}\left|H'\right|\psi_2^{(0)}\right\rangle=\frac{V_0}{2}$$

$$\left\langle\psi_3^{(0)}\left|H'\right|\psi_3^{(0)}\right\rangle=\frac{V_0}{2}$$

所以前三个态能量准确到一级微扰论近似为

$$\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}+\frac{V_0}{2},\qquad \frac{2\pi^2\hbar^2}{\mu a^2}+\frac{V_0}{2},\qquad \frac{9\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}+\frac{V_0}{2}$$

6.3 微扰论计算一维谐振子基态能量的相对论修正

题 6.3 一个质量为 m 的粒子在一维谐振子势场中运动. 在动能 T 与动量 p 有如下关系 $T=\frac{p^2}{2m}$ 的非相对论极限下，基态能量是我们熟知的，为 $\frac{1}{2}\hbar\omega$. 考虑 T 与 p 关系的相对论修正，计算基态能级的移动 ΔE 至 $\frac{1}{c^2}$ 阶，c 为光速.

解 在相对论情形下，动能形式上定义为

$$T\equiv E-mc^2=\sqrt{m^2c^4+p^2c^2}-mc^2=mc^2\left(1+\frac{p^2}{m^2c^2}\right)^{1/2}-mc^2$$

考虑 T 与 p 关系的相对论修正至 $\frac{1}{c^2}$ 阶

$$T\approx mc^2\left(1+\frac{p^2}{2m^2c^2}-\frac{p^4}{8m^4c^4}\right)-mc^2$$

$$=\frac{p^2}{2m}-\frac{p^4}{8m^3c^2}$$

而相对论修正项 $\frac{-p^4}{8m^3c^2}$ 可看作微扰.

由微扰论，基态能级的移动为

$$\Delta E=\left\langle-\frac{p^4}{8m^3c^2}\right\rangle$$

$$=\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right]\left(-\frac{\hbar^4}{8m^3c^2}\cdot\frac{\partial^4}{\partial x^4}\right)\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right]dx$$

$$=-\frac{15}{32}\cdot\frac{(\hbar\omega)^2}{mc^2}$$

近似到 $\frac{1}{c^2}$ 阶的基态能级的移动为

$$\Delta E=-\frac{15}{32}\cdot\frac{(\hbar\omega)^2}{mc^2}$$

6.4 Coulomb 场中电子在微扰势 $V_{微扰}=f(r)xy$ 作用下，能级的变化

题 6.4 一个电子在力心位于坐标原点的 Coulomb 场中运动，若不考虑自旋和相对论修正，第一激发态($n=2$)是四重简并的：$l=0, m_l=0$; $l=1, m_l=1,0,-1$. 现考虑一附加的非有心势 $V_{微扰}$：$V_{微扰}=f(r)xy$，其中 $f(r)$ 是某个径向函数. 在一级微扰近似下，$n=2$ 能级分裂成几个能量不同的能级，每一个有其各自的能级移动 ΔE 和简并度. (1) 有多少不同的能级? (2) 各能级的简并度为多少? (3) 设其中一个的能级移动为 A，其他能级的能级移动为多少?

解 微扰前 $n=2$ 能级的波函数分别为

$$l=0,\quad m_l=0,\quad R_{20}(r)Y_{00}$$

$$l=1,\quad m_l=1,\quad R_{21}(r)Y_{11}$$

$$l=1,\quad m_l=0,\quad R_{21}(r)Y_{10}$$

$$l=1,\quad m_l=-1,\quad R_{21}(r)Y_{1,-1}$$

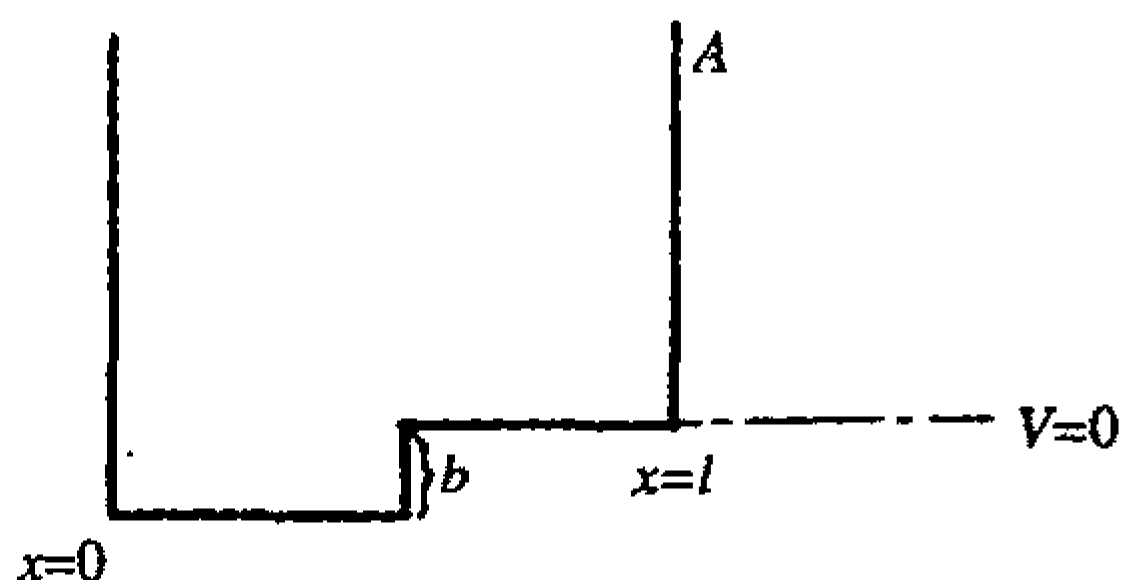
注意到微扰 $V=f(r)xy=f(r)r^2\sin^2\theta\sin\varphi\cos\varphi$ 只在 $R_{21}(r)Y_{11}$ 和 $R_{21}(r)Y_{1,-1}$ 之间才有非零的矩阵元，决定能级移动的久期方程为

$$\det\left|\begin{pmatrix}0&0&0&0\\0&0&0&Ai\\0&0&0&0\\0&-Ai&0&0\end{pmatrix}-\Delta EI\right|=0$$

所以 $\Delta E=A$ (一重简并)，$-A$ (一重简并)，0(二重简并). 故有三个能级，能量移动为 A(一重简并)，$-A$ (一重简并)，0(二重简并).

6.5 一维无限深势阱中有一小势阱时的基态能量一级修正

题 6.5 一粒子在有一小势阱的一维刚性盒中运动(题图 6.5) $V=\infty, x>l$ 或 $x<0$，$V=-b$, $0<x<\frac{l}{2}$；$V=0$, $\frac{l}{2}<x<l$；将该势坑视为一个“规则的”刚性盒($V=\infty$, $x>l$ 或 $x<0$, $V=0$, $0<x<l$)的一个微扰. 求出基态的第一级能量.



题图 6.5

解 对于“规则”刚性盒，基态能量和波函数为

$$E^{(0)}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2},\qquad \psi^{(0)}(x)=\sqrt{\frac{2}{l}}\sin\frac{\pi x}{l}$$

一级微扰修正为

$$E^{(1)}=\int_0^{l/2}\mathrm{d}x\cdot\frac{2}{l}\sin^2\left(\frac{\pi x}{l}\right)\cdot(-b)$$

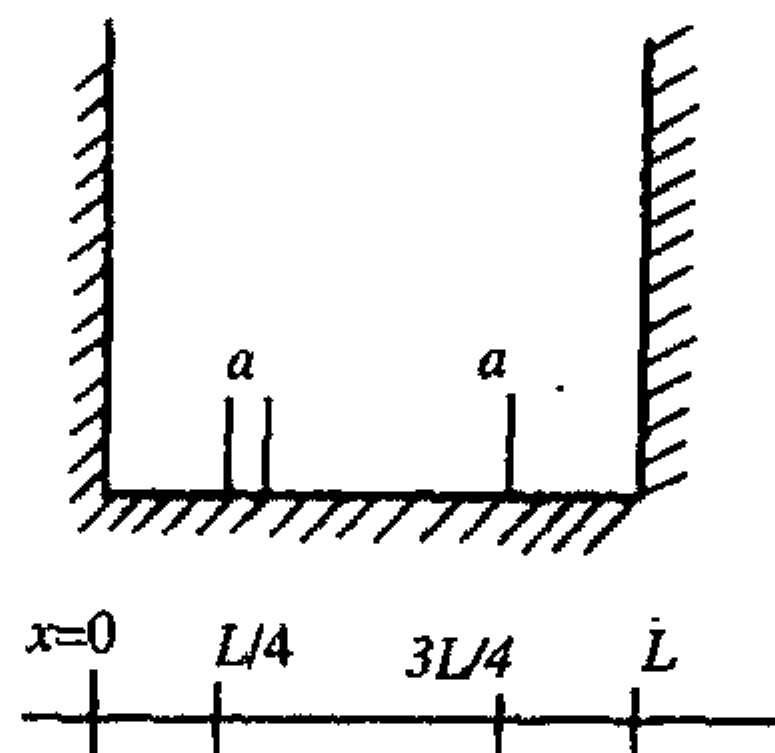
$$=-\frac{b}{l}\int_0^{l/2}\mathrm{d}x\cdot\left(1-\cos\frac{2\pi x}{l}\right)=-\frac{b}{2}$$

到一级微扰，基态能量为

$$E=E^{(0)}+E^{(1)}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ml^2}-\frac{b}{2}$$

6.6　微扰论计算有两个小势垒的无限深势阱中能量一级修正

题 6.6　一个一维无限深势阱在 $x=0$ 及 $x=L$ 处有 2 个壁. 2 个宽为 a，高为 V 的小微扰势位于 $x=L/4$ 和 $x=3L/4$ 处；(题图 6.6)；a 是小量(如 $a\ll L/100$). 利用微扰方法估计由于该微扰所产生的 $n=2$ 与 $n=4$ 能级间的能量差的变化.



题图 6.6

解　一维无限深势阱能级和波函数为

$$E_n^{(0)}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu L^2}n^2,\qquad n=1,2,\cdots$$

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{\pi n}{L}x$$

一级微扰下第 n 能级的移动为

图

$$E_n^{(1)}=H'_{nn}$$

$$H'_{nn}=\int_{L/4-a/2}^{L/4+a/2}V\frac{2}{L}\sin^2\frac{\pi n}{L}x\mathrm{d}x+\int_{3L/4-a/2}^{3L/4+a/2}V\frac{2}{L}\sin^2\frac{\pi n}{L}x\mathrm{d}x$$

因为 $a\ll L/100$，利用积分中值定理得

$$H'_{nn}=\frac{2Va}{L}\left[\sin^2\frac{\pi n}{L}\left(\frac{L}{4}\right)+\sin^2\frac{\pi n}{L}\left(\frac{3L}{4}\right)\right]$$

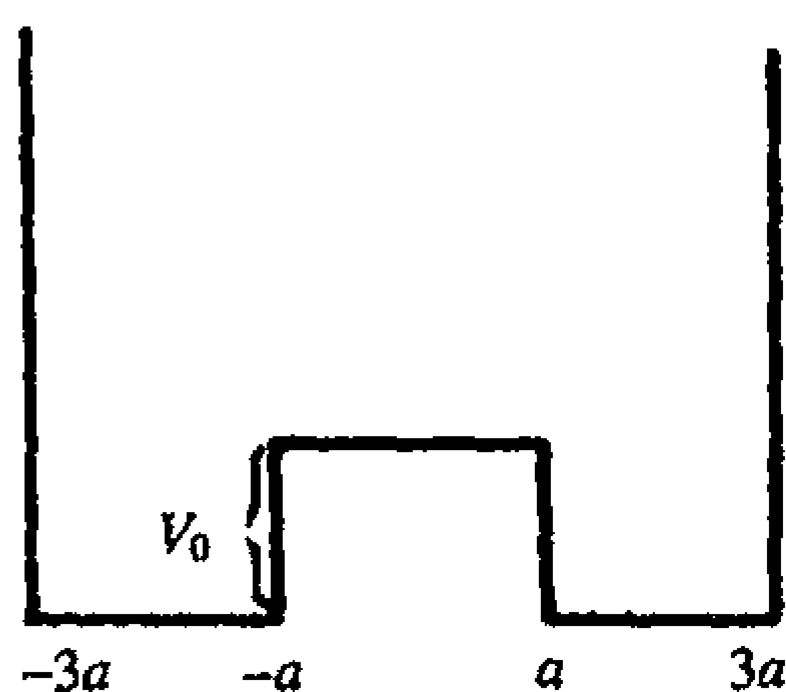
$$=\frac{2Va}{L}\left(\sin^2\frac{\pi n}{4}+\sin^2\frac{3\pi n}{4}\right)$$

在一级微扰近似下，$n=2$ 与 $n=4$ 两能级间能量差的变化为

$$E_2^{(1)}-E_4^{(1)}=\frac{2Va}{L}\left(\sin^2\frac{\pi}{2}+\sin^2\frac{3\pi}{2}-\sin^2\pi-\sin^2 3\pi\right)=\frac{4Va}{L}$$

6.7　微扰论计算有一个小势垒的无限深势阱中的基态能量

题 6.7　一个质量为 m 的粒子在一维势盒中运动



题图 6.7

$$V(x)=\begin{cases}\infty, & |x|>3a\\ 0, & a<x<3a\\ 0, & -3a<x<-a\\ V_0, & -a<x<a\end{cases}$$

如题图 6.7 所示. 将 V_0 部分视为在 $6a$ 长的平坦盒子（$V=0,-3a<x<3a;\ V=\infty,|x|>3a$）上的微扰. 用一级微扰方法计算基态能量.

解 在 $6a$ 长的平坦盒子中，粒子能级与波函数分别为

$$E^{(0)}=\frac{\pi^2\hbar^2n^2}{72ma^2},\qquad n=1,2,\ldots$$

偶宇称解为

$$\psi^{(0)}(x)=\sqrt{\frac{1}{3a}}\cos\frac{n\pi x}{6a},\qquad n\text{为奇数}$$

奇宇称解为

$$\psi^{(0)}(x)=\sqrt{\frac{1}{3a}}\sin\frac{n\pi x}{6a},\qquad n\text{为偶数}$$

基态为

$$\psi_1^{(0)}(x)=\sqrt{\frac{1}{3a}}\cos\frac{\pi x}{6a}$$

$$E_1^{(0)}=\frac{\pi^2\hbar^2}{72ma^2}$$

一级微扰修正为

$$E^{(1)}=(\psi_1^{(0)}(x),\ V\psi_1^{(0)}(x))$$

其中

$$V=\begin{cases}V_0, & -a<x<a\\ 0, & |x|>a\end{cases}$$

$$E^{(1)}=\int_{-a}^{a}\mathrm{d}x\frac{V_0}{3a}\cos^2\left(\frac{\pi x}{6a}\right)=V_0\left(\frac{1}{3}+\frac{\sqrt{3}}{2\pi}\right)$$

基态能量在一级微扰下为

$$E=E^{(0)}+E^{(1)}=\frac{\pi^2\hbar^2}{72ma^2}+V_0\left(\frac{1}{3}+\frac{\sqrt{3}}{2\pi}\right)$$

6.8　微扰势 $\delta V=\dfrac{\lambda}{x^2+a^2}$，一维谐振子基态的能量修正

题 6.8　一维谐振子受一小微扰势 $\delta V(x)$ 作用，在运动中心产生一“微凹”，那么

$$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2+\frac{\lambda}{x^2+a^2}=\frac{p^2}{2m}+V+\delta V$$

考虑下面两种情况

$$(1)\ a\ll\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}},\qquad (2)\ a\gg\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

分别计算该振子的基态能量的一级修正.

提示　谐振子的归一化基态波函数为

$$\psi_0(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left(\frac{-m\omega x^2}{2\hbar}\right)$$

且

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}x}{x^2+a^2}=\frac{\pi}{a}$$

解　基态能量一级修正为

$$\Delta E=\langle 0|\delta V|0\rangle=\lambda\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{e}^{-m\omega x^2/\hbar}}{x^2+a^2}\mathrm{d}x$$

(1) $a\ll\sqrt{\hbar/m\omega}$

$$\Delta E=\lambda\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{e}^{-m\omega a^2y^2/\hbar}}{a(y^2+1)}\mathrm{d}y\approx\frac{\lambda}{a}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}y}{y^2+1}=\frac{\lambda}{a}\sqrt{\frac{m\omega\pi}{\hbar}}$$

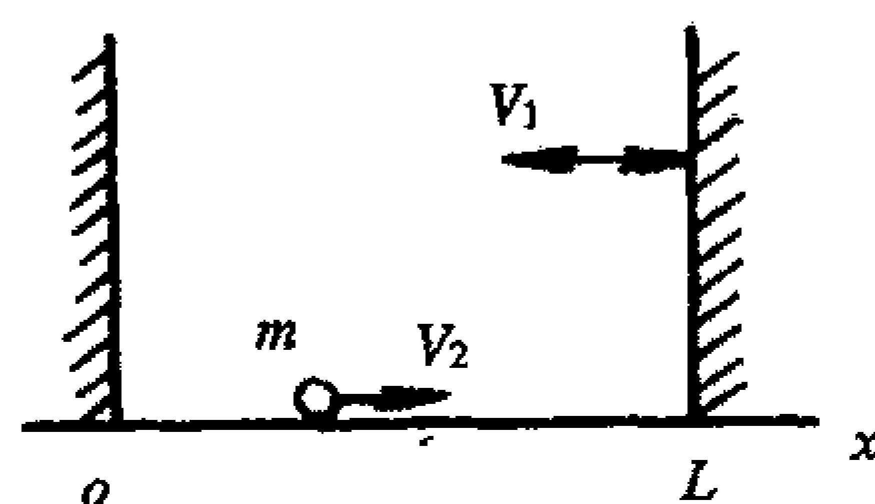
(2) $a\gg\sqrt{\hbar/m\omega}$

$$\Delta E=\frac{\lambda}{a}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{e}^{-m\omega a^2y^2/\hbar}}{y^2+1}\mathrm{d}y$$

$$\approx\frac{\lambda}{a}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-m\omega a^2y^2/\hbar}\mathrm{d}y=\frac{\lambda}{a^2}$$

6.9　弹性球在缓慢移动墙之间运动时能量随时间的变化

题 6.9　一完全弹性的球在两平行墙之间弹跳. (1) 运用经典力学,计算当墙匀速缓慢靠扰时球在单位时间内的能量变化. (2) 证明在球的量子数不变情况下，关于球能量变化的量子力学结果与(1)中结果相同. (3) 如果球处在 $n=1$ 的量子态上，墙怎样运动才能保证球仍在 $n=1$ 态上?



题图 6.9

解 (1)

$$E=\frac{p^2}{2m}$$

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t}=\frac{p}{m}\cdot\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t}$$

由于墙缓慢运动，球为完全弹性，所以在 $\Delta t=\dfrac{2L}{v_2}$ 时间内球与右墙相碰一次(题图 6.9). 因球是完全弹性的，与右墙相碰时，球相对右墙速率不变：$|v_2'-v_1|=|v_2+(-v_1)|$，所以

$$v_2'-v_2=2v_1$$

$$\Delta p=m(v_2'-v_2)=2mv_1$$

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t}=\frac{p}{m}\cdot\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t}\approx\frac{p}{m}\cdot\frac{\Delta p}{\Delta t}=\frac{p}{m}2mv_1\cdot\frac{v_2}{2L}$$

由于右墙运动缓慢

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t}=\frac{pv_2}{L}v_1=-\frac{p}{L}\cdot\frac{p}{m}\cdot\frac{\mathrm{d}L}{\mathrm{d}t}$$

$$=-\frac{2}{L}\cdot\frac{p^2}{2m}\frac{\mathrm{d}L}{\mathrm{d}t}=-\frac{2E}{L}\cdot\frac{\mathrm{d}L}{\mathrm{d}t}$$

所以经典结果为

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t}=-\frac{2E}{L}\cdot\frac{\mathrm{d}L}{\mathrm{d}t}$$

(2) 右墙不动时，$E_n=\dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$. 当 n 不变时

$$\frac{\mathrm{d}E_n}{\mathrm{d}t}=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m}(-2)\frac{1}{L^3}\cdot\frac{\mathrm{d}L}{\mathrm{d}t}=-\frac{2E_n}{L}\cdot\frac{\mathrm{d}L}{\mathrm{d}t}$$

所以量子理论结果与经典力学结果形式相同.

(3) 当球每次与墙相撞所获得的能量远小于 E_2 与 E_1 之差时，球仍可留在 $n=1$ 态上(此实际上类似热学中的绝热条件).

由 $E=\dfrac{p^2}{2m}$，$\Delta E=\dfrac{p}{m}\Delta p$，得

$$\Delta E=\sqrt{\frac{2E}{m}}\cdot 2mv_1=2\sqrt{2mE}v_1$$

由 $E_2-E_1\gg|\Delta E|$，得

$$\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}(2^2-1^2)\gg 2\sqrt{2m\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}}|v_1|$$

所以

$$|v_1|\ll\frac{3\pi\hbar}{4mL}$$

即右墙的运动速度远小于 $\dfrac{3\pi\hbar}{4mL}$.

6.10　在一维无限深阱中突然加上方势垒后电子的跃迁

题 6.10　考虑处于长为 0.1nm 的“一维盒子”中的一个电子. (1) 求前 4 个波函数并绘草图(将波函数归一化). (2) 计算对应的 4 个能级并画出能级图. (3) 在 $t=0$ 时，粒子处于

$n=1$的态. 此时突然加上一个$V_0=-10^4\text{eV}$，宽度为10^{-12}cm，中心在$a/2$的方势阱，保持$5\times10^{-18}\text{s}$后撤去. 在这个微扰移掉后，体系被发现处于$n=2,n=3,n=4$态的概率是多少(势阱的高度和宽度对于中子与电子相互作用是特征性的)?

注意　可用所画的图帮助估计有关的矩阵元.

解　(1) 令a=0.1nm，则势可写成

$$V(x)=\begin{cases}0, & 0\leqslant x\leqslant a\\ \infty, & \text{其他}\end{cases}$$

Schrödinger 方程为

$$\begin{cases}\psi''(x)+\dfrac{2mE}{\hbar^2}\psi(x)=0, & x\in[0,a]\\ \psi(x)=0, & x\overline{\in}[0,a]\end{cases}$$

立刻可解出

$$\psi_n=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi x}{a}, & x\in[0,a],\quad n=1,2,\cdots\\ 0, & x\overline{\in}[0,a]\end{cases}$$

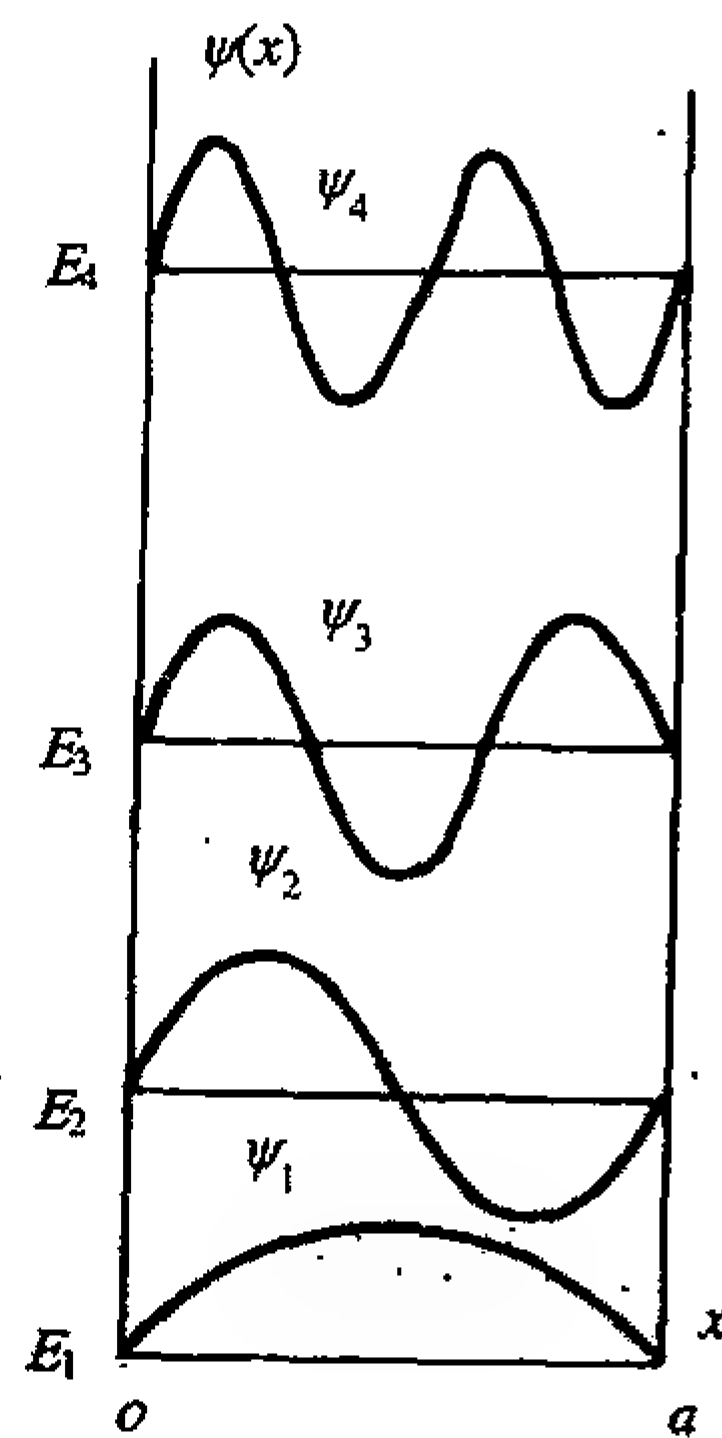
前 4 个波函数为

$$\psi_1(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{\pi x}{a}\\ 0\end{cases}$$

$$\psi_2(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{2\pi x}{a}\\ 0\end{cases}$$

$$\psi_3(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{3\pi x}{a}\\ 0\end{cases}$$

$$\psi_4(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{4\pi x}{a}\\ 0\end{cases}$$



题图 6.10(a)

如题图 6.10(a)所示.

(2) 解 Schrödinger 方程，由波函数的连续性可得能级

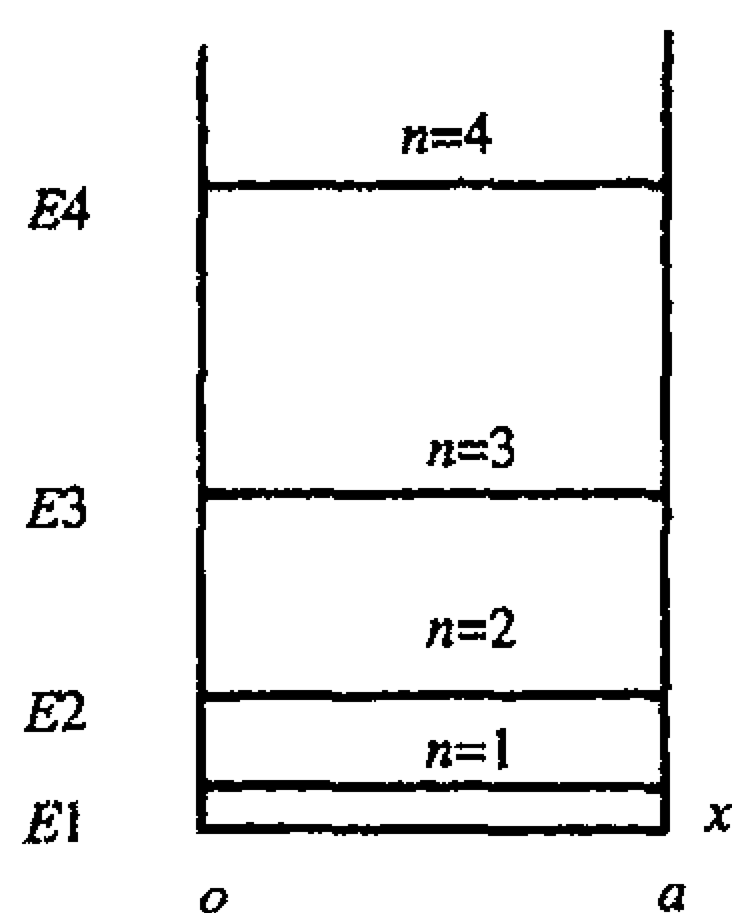
$$E_n=\frac{\hbar^2\pi^2n^2}{2ma^2},\qquad n=1,2,\cdots$$

$$E_1=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}=0.602\times10^{-10}\text{erg}=37.4\text{eV}$$

$$E_2=4E_1=2.408\times10^{-10}\text{erg}=149.6\text{eV}$$

$$E_3 = 9E_1 = 5.418\times10^{-10}\text{erg} = 336.6\text{eV}$$

$$E_4 = 16E_1 = 9.632\times10^{-10}\text{erg} = 598.4\text{eV}$$



题图 6.10(b)

如题图 6.10(b)所示.

(3) 末态处于 k 态的概率为

$$P_k = \frac{1}{\hbar^2}|H'_{1k}|^2\left|\int_0^{t_0} e^{i\omega_{k1}t}dt\right|^2$$

$$= \frac{1}{\hbar^2}|H'_{1k}|^2\frac{\sin^2(\omega_{k1}t_0/2)}{(\omega_{k1}/2)^2}, \qquad t_0 = 5\times10^{-18}\text{s}$$

$H'_{1k} = \int_{\frac{1}{2}a-b}^{\frac{1}{2}a+b}\frac{2}{a}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{k\pi x}{a}\right)V_0\cdot dx$, $\quad b = \frac{1}{2}\times10^{-12}\text{cm}$. 由于 $b \ll a$，可用积分中值定理

$$H'_{1k} = \frac{4b}{a}V_0\sin\frac{\pi}{2}\sin\frac{k\pi}{2} = -2\sin\frac{k\pi}{2}\text{eV}$$

$$H'_{12} = 0, \qquad H'_{13} = 2\text{eV}, \qquad H'_{14} = 0$$

所以

$$P_2 = P_4 = 0$$

$$P_3 = \frac{16}{\hbar^2\omega_{31}^2}\sin^2\left(\frac{1}{2}\omega_{31}t_0\right) = 1.45\times10^{-4}$$

式中

$$\hbar\omega_{31} = 336.6 - 37.4 = 299.2\text{eV}$$

6.11 一维带电谐振子放入电场后基态能量的移动

题 6.11 一带电粒子被约束在谐振子势 $V = \frac{1}{2}kx^2$ 内，系统处于一恒定常数外电场 E 中，试计算基态能级移动. 准确至 E^2 级.

解 选电场方向为 x 轴，系统 Hamilton 量为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2 - qEx = H_0 + H'$$

式中，$H' = -qEx$.

谐振子的基态波函数

$$\psi_0(x) = \langle x|0\rangle = \sqrt[4]{\frac{\alpha^2}{\pi}}\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2x^2\right), \qquad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

$$\omega=\sqrt{\frac{K}{m}}$$

ψ_0为偶函数，所以$\langle 0|H'|0\rangle=0$. 由

$$\langle n'|x|n\rangle=\frac{1}{\alpha}\left(\sqrt{\frac{n}{2}}\delta_{n',n-1}+\sqrt{\frac{n+1}{2}}\delta_{n',n+1}\right)$$

得

$$H'_{0,n}=-qE\langle 0|x|n\rangle=-\frac{qE}{\sqrt{2}\alpha}\delta_{n,1}$$

所以基态准确到E^2级的能移为

$$\Delta E_0^{(2)}=\sum_n{}'\frac{|H'_{0,n}|^2}{E_0^{(0)}-E_n^{(0)}}=\sum_n{}'\frac{\left(q^2E^2/2\alpha^2\right)\delta_{n,1}{}'}{-n\hbar\omega}$$

$$=-\frac{q\ E^2}{2\hbar\omega\alpha^2}=-\frac{q^2E^2}{2m\omega^2}$$

6.12　一维谐振子在$V=\alpha y^3$微扰时，能量的最低级修正

题 6.12　对于一维谐振子，引入无量纲的坐标和能量变量$y=x(m\omega_0/\hbar)^{1/2}$，$\varepsilon_n=2E_n/(\hbar\omega_0)$，给出以$T=-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2}$和$V=y^2$分别为动能算符和势能的 Schrödinger 方程. (1) 利用偶极矩阵元仅有$\langle n+1|y|n\rangle=\sqrt{\frac{n+1}{2}}$(和它的 Hermite 共轭)不为 0 的事实，求与基态$|0\rangle$相连的所有y^3非零矩阵元的值. (2) 谐振子被一个非简谐势$V'=\alpha y^3$干扰，求基态能量的最低级非零修正.

解　(1) 显然$\langle m|y|n\rangle=\sqrt{\frac{m}{2}}\delta_{n,m-1}+\sqrt{\frac{n}{2}}\delta_{m,n-1}$，所以

$$\langle m|y^3|0\rangle=\sum_{k,l}\langle m|y|k\rangle\langle k|y|l\rangle\langle l|y|0\rangle$$

$$=\frac{3}{2\sqrt{2}}\delta_{m,1}+\frac{\sqrt{3}}{2}\delta_{m,3}$$

(2) 因为$\langle 0|y^3|0\rangle=0$，所以一级能量修正为 0. 计算二级能量修正

$$\Delta E_2=\sum_{n\neq 0}\frac{|\langle 0|\alpha y^3|n\rangle|^2}{1-\varepsilon_n}$$

$$=|\alpha|^2\left(\frac{|\langle 0|y^3|1\rangle|^2}{-2}-\frac{|\langle 0|y^3|3\rangle|^2}{6}\right)=-\frac{11}{16}|\alpha|^2$$

这就是最低级能量修正.

6.13　一维谐振子在与时间无关微扰下的能量修正

题 6.13　考虑频率为 ω_0 的一维谐振子. 用 n 标记能量本征值. n 最低从 0 开始. 在初始的谐振子势上加上一个与时间无关的微扰 Hamilton 量：$H'=V(x)$. 我们用非微扰本征态表示下 $V(x)$ 的矩阵元代替给出微扰 $V(x)$ 的形式. 除非 m 和 n 是偶数，否则 H' 的矩阵元为 0. 给出这个矩阵的一部分如下，其中 ε 是一个小的无量纲常数(注意在这个矩阵中指标是 $n=0\sim4$).

$$\varepsilon\hbar\omega_0\begin{pmatrix} 1 & 0 & -\sqrt{1/2} & 0 & \sqrt{3/8} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\sqrt{1/2} & 0 & 1/2 & 0 & -\sqrt{3/16} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{3/8} & 0 & -\sqrt{3/16} & 0 & 3/8 \end{pmatrix}$$

(1) 对前五个能级，精确到一级微扰，求新能级；(2) 对 $n=0,1$，求新的能量至二阶微扰.

解　(1) 一阶微扰论给出能级为

$$E_n'=E_n+H_{nn}'$$

所以

$$E_0'=\frac{1}{2}\hbar\omega_0+\varepsilon\hbar\omega_0=\left(\frac{1}{2}+\varepsilon\right)\hbar\omega_0$$

$$E_1'=\frac{3}{2}\hbar\omega_0$$

$$E_2'=\hbar\omega_0\left(\frac{5}{2}+\frac{1}{2}\varepsilon\right)$$

$$E_3'=\frac{7}{2}\hbar\omega_0$$

$$E_4'=\hbar\omega_0\left(\frac{9}{2}+\frac{3}{8}\varepsilon\right)$$

(2) 二阶微扰论给出的能级为

$$E_0''=\frac{1}{2}\hbar\omega_0+\varepsilon\hbar\omega_0+\sum_{k\neq0}\frac{1}{-k\hbar\omega_0}|H_{k0}'|^2$$

$$=\hbar\omega_0\left[\frac{1}{2}+\varepsilon-\varepsilon^2\left(\frac{1}{4}+\frac{3}{32}+\cdots\right)\right]$$

$$E_1''=\frac{3}{2}\hbar\omega_0+0+\sum_{k\neq1}\frac{1}{(1-k)\hbar\omega_0}|H_{k1}'|^2$$

$$=\hbar\omega_0\left(\frac{3}{2}+0+0\right)=\frac{3}{2}\hbar\omega_0$$

6.14　一维谐振子在微扰 $V(x)=\frac{1}{2}kx^2+cx^4$ 下的基态能量改变

题 6.14　质量为 m，角频率 ω 的一维谐振子的势函数为 $V(x)=\frac{1}{2}kx^2+cx^4$，第二项比第一项小得多：(1) 证明非谐振项的一阶效应使基态能量 E_0 改变 $3c\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2$. (2) 若在势中加一个 x^3 项，一阶效应是什么？

解　(1) 由势的表达式有

$$E^{(1)}=\langle n|H^{(1)}|n\rangle=c\langle 0|x^4|0\rangle \tag{1}$$

利用产生、湮灭算符，有

$$x=\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2}(a+a^{\dagger}) \tag{2}$$

所以

$$\langle 0|x^4|0\rangle=\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2\langle 0|(a+a^{\dagger})^4|0\rangle \tag{3}$$

若算符 A 是数个 a 与 $a^{\dagger}$ 的乘积(顺序任意)，那么

$$\langle n|A|n\rangle=0 \tag{4}$$

除非 a 与 $a^{\dagger}$ 的数目相等. 因为若不等，$A|n\rangle$ 一定不同于 $|n\rangle$. 由正交性，式(4)成立. 而且当 $n=0$ 时，像 $a^{\dagger}aa^{\dagger}a$ 也使式(4)为零，因为 $A|0\rangle=0$，所以对 $\langle 0|x^4|0\rangle$ 中非零项来自两项，$aaa^{\dagger}a^{\dagger}$ 和 $aa^{\dagger}aa^{\dagger}$，利用

$$a^{\dagger}|n\rangle=\sqrt{n+1}|n+1\rangle,\qquad a|n\rangle=\sqrt{n}|n-1\rangle \tag{5}$$

容易证得

$$\langle 0|aaa^{\dagger}a^{\dagger}|0\rangle=2,\qquad \langle 0|aa^{\dagger}aa^{\dagger}|0\rangle=1 \tag{6}$$

由式(1)，式(3)，式(6)，有

$$E^{(1)}=3c\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2$$

(2) 势函数若有 x^3，它的一阶效应为零. 这对所有 x 的奇次幂都适用. 因为这时，上述算符 A 中 a 与 $a^{\dagger}$ 的数目必定不相等，以至于 $\langle 0|x^{2k+1}|0\rangle=0$.

6.15　一位谐振子在微扰 $\frac{\delta k}{2}x^2$ 作用下，能量二级修正

题 6.15　质量为 m、角频率为 ω 的谐振子的势为 $V^{(0)}=\frac{1}{2}kx^2,\omega=\sqrt{\frac{k}{m}}$，一个小的微扰项，$V^{(1)}=\frac{\delta k}{2}x^2$ 加在 $V^{(0)}$ 上. (1) 证明基态能量的一阶与二阶修正为

$$E^{(1)}=\frac{1}{4}\frac{\delta k}{k},\qquad E^{(2)}=-\frac{1}{16}\left(\frac{\delta k}{k}\right)^2\hbar\omega$$

(2) 与能量的严格解进行比较.

解 (1) $H=H^{(0)}+H^{(1)}$, $H^{(1)}=\frac{1}{2}\delta kx^2$，基本态矢组是$H^{(0)}$的本征态$|n\rangle$，$H^{(0)}$是未微扰的简谐振子，它们正交归一，即$\langle n|n'\rangle=\delta_{nn'}$

$$E^{(1)}=\langle n|H^{(1)}|n\rangle=\frac{1}{2}\delta k\langle 0|x^2|0\rangle \tag{1}$$

由式上题(4)式、式(1)知

$$\langle 0|x^2|0\rangle=\frac{\hbar}{2m\omega}$$

这样

$$E^{(1)}=\frac{1}{2}\delta k\frac{\hbar}{2m\omega}=\frac{1}{4}\cdot\frac{\delta k}{k}\hbar\omega$$

二阶能量项为

$$E^{(2)}=\sum_{j\neq 0}\frac{\left|H_{j_0}^{(1)}\right|^2}{E_0-E_j} \tag{2}$$

$$H_{j_0}^{(1)}=\frac{1}{2}\delta k\langle j|x^2|0\rangle=\frac{1}{2}\delta k\frac{\hbar}{2m\omega}\langle j|(a+a^\dagger)^2|0\rangle \tag{3}$$

因为$j\neq 0$，由$a,a^\dagger$的阶梯性质导致只有$j=2$时，$H_{j_0}^{(1)}$不为零.

使$|0\rangle$转变为$|2\rangle$的一对算符是$a^\dagger a^\dagger$，代入(3)，有

$$H_{20}^{(1)}=\frac{\sqrt{2}}{2}\delta k\frac{\hbar}{2m\omega}$$

而且$E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega, E_2=\frac{5}{2}\hbar\omega$，代入(2)

$$E^{(2)}=-\frac{1}{16}(\delta k)^2\frac{\hbar}{m^2\omega^2}=-\frac{1}{16}\left(\frac{\delta k}{k}\right)^2\hbar\omega$$

(2) 此题可严格求解，设基态能量为

$$E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega=\frac{1}{2}\hbar\left(\frac{k}{m}\right)^{1/2}$$

所以微扰谐振子能量为

$$\begin{aligned}E&=\frac{1}{2}\hbar\left(\frac{k+\delta k}{m}\right)^{1/2}\\&=\frac{1}{2}\hbar\omega\left(1+\frac{\delta k}{k}\right)^{1/2}\\&=\frac{1}{2}\hbar\omega\left\{1+\frac{1}{2}\frac{\delta k}{k}-\frac{1}{8}\left(\frac{\delta k}{k}\right)^2+O\left(\frac{\delta k}{k}\right)^3\right\}\end{aligned}$$

最后一行中二次项仅在 $\delta k \ll k$ 时有用，即 $H^{(1)} \ll H^{(0)}$. 从上式可见，$\dfrac{\delta k}{k}$ 的一次项、二次项分别等于微扰理论的一阶近似与二阶近似.

通常我们无法获得精确解，所以我们求助于微扰理论. 本题证明当 $\delta k \ll k$ 时，微扰理论提供了好的近似.

6.16 电场使带电谐振子能量降低

题 6.16 质量为 m、电量 e 的粒子在谐振势中以 ω 振动，(1) 用微扰论证明：加一个电场 ε 使所有能级降低 $e^2\varepsilon^2/(2m\omega^2)$. (2) 与经典结果比较.

解 (1) 加电场 ε 后

$$H^{(1)} = -e\varepsilon x$$

设 $H_0 = \dfrac{1}{2m}P^2 + \dfrac{1}{2}m\omega^2 x^2$ 的本征态为 $|n\rangle$，由题 6.14(6)式可知，能量的一级微扰为

$$E^{(1)} = -e\varepsilon\langle n|x|n\rangle = 0$$

二阶能量修正为

$$E^{(2)} = \sum_{j\neq n}\frac{\left|H_{jn}^{(1)}\right|^2}{E_n - E_j}$$

这里

$$H_{jn}^{(1)} = -e\varepsilon\langle j|x|n\rangle$$

因为

$$x|n\rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2}\left(\sqrt{n}|n-1\rangle + \sqrt{n+1}|n+1\rangle\right)$$

所以

$$\langle n+1|x|n\rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2}\sqrt{n+1}, \qquad \langle n-1|x|n\rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2}\sqrt{n}$$

而且

$$E_n - E_{n+1} = -\hbar\omega, \qquad E_n - E_{n-1} = \hbar\omega$$

所以

$$E^{(2)} = e^2\varepsilon^2\frac{\hbar}{2m\omega}\cdot\frac{1}{\hbar\omega}\left[-(n+1)+n\right] = -\frac{e^2\varepsilon^2}{2m\omega^2} \tag{1}$$

事实上本题与上题一样可精确求解. 式(1)即能量变化的准确值.

(2) 经典的势函数为

$$V = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - \varepsilon e x \tag{2}$$

有极小值，当

$$\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x} = m\omega^2 x - \varepsilon e = 0, \qquad \text{即 } x = \frac{\varepsilon e}{m\omega^2}$$

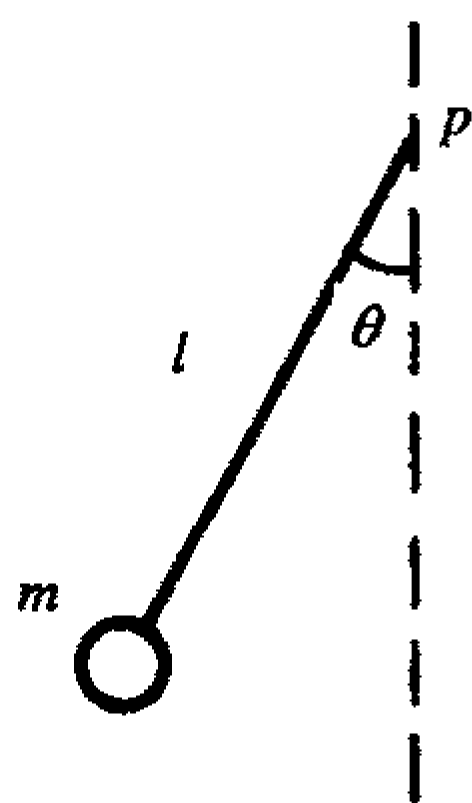
这样，当$\varepsilon=0$时，平衡位置$x=0$，能量$E=V=0$．当$\varepsilon=\varepsilon$，平衡位置$x=\varepsilon e/m\omega^2$，代入式(2)，有

$$E=V_{\min}=-\frac{e^2\varepsilon^2}{2m\omega^2}$$

由此可见，经典结果与量子结果相同，这点不用奇怪，因为结果中不含有$\hbar$.

6.17 小角度单摆的能级及小角度近似误差产生的基态能量的最低阶修正

题 6.17 一根长为l无质量的绳子一端固定于支点p,另一端系质点m. 在重力作用下，质点在竖直平面内摆动如题图 6.17 所示. (1) 在小角近似下求系统能级. (2) 求由于小角近似的误差而产生的基态能量最低阶修正.



题图 6.17

解 (1) 以小球平衡位置为势能零点

$$V=mgl(1-\cos\theta)\approx\frac{1}{2}mgl\theta^2$$

(小角近似)

$$H=\frac{1}{2}ml^2\dot{\theta}^2+\frac{1}{2}mgl\theta^2$$

与一维谐振子系统比较，得系统能级为

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\qquad \omega=\sqrt{\frac{g}{l}}$$

(2) 微扰 Hamilton 量

$$H'=mgl(1-\cos\theta)-\frac{1}{2}mgl\theta^2$$

$$\approx-\frac{1}{24}mgl\theta^4=-\frac{1}{24}\frac{mg}{l^3}x^4,\qquad x=l\theta$$

利用$x|0\rangle=\frac{1}{\alpha}\sqrt{\frac{1}{2}}|1\rangle$，$\alpha=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$，得

$$x^2|0\rangle=\frac{\hbar}{m\omega}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}|2\rangle+\frac{1}{2}|0\rangle\right)$$

所以基态能量的一级修正为

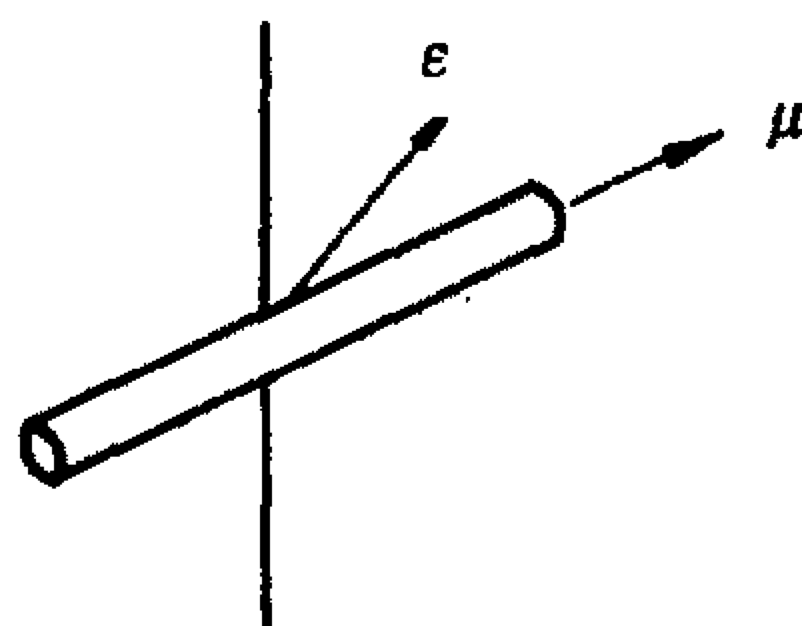
$$E'=\langle 0|H'|0\rangle=-\frac{1}{24}\frac{mg}{l^3}\times\frac{\hbar^2}{m^2\omega^2}\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{4}\right)=-\frac{\hbar^2}{32ml^2},\qquad 代入\omega^2=\frac{g}{l}$$

6.18 刚性转子在弱电场中的能量修正

题 6.18 一量子力学刚性转子被约束在一平面内转动它对转轴的转动惯量是I，并有电偶极矩μ(位于平面内). 转子放在一弱均匀电场ε中，电场位于转动平面内如题图 6.18 所示. 将电场看成微扰，求能级修正值.

解　无外场作用时，$H_0=-\frac{\hbar^2}{2I}\cdot\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}$，本征方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2I}\cdot\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2}=E\psi$$



题图 6.18

解为

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\theta},\qquad m=0,\pm1,\pm2,\cdots$$

$$E_m^{(0)}=\frac{\hbar^2m^2}{2I}$$

微扰 Hamilton 量为(选 x 方向为 ε 方向)

$$H'=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}=-\mu\varepsilon\cdot\cos\theta$$

能量一级修正为

$$E^{(1)}=0$$

能量二级修正为

$$E^{(2)}=\sum_{m'}{}'\frac{|\langle m'|H'|m\rangle|^2}{E_m^{(0)}-E_{m'}^{(0)}}$$

$$\langle m'|H'|m\rangle=-\frac{\mu\varepsilon}{2\pi}\int_0^{2\pi}d\theta e^{i(m-m')\theta}\cos\theta$$

$$=-\frac{\mu\varepsilon}{2}\left[\delta_{m',m+1}+\delta_{m',m-1}\right]$$

$$E^{(2)}=\frac{\mu^2\varepsilon^2}{4}\cdot\frac{2I}{\hbar^2}\left[\frac{1}{m^2-(m-1)^2}+\frac{1}{m^2-(m+1)^2}\right]$$

$$=\frac{\mu^2\varepsilon^2I}{\hbar^2}\cdot\frac{1}{4m^2-1}$$

6.19　双原子分子的转动能级及其在弱电场中的能级移动

题 6.19　双原子分子在弱电场中极化，可以处理成一个转动惯量为 I，电偶极矩为 $\boldsymbol{d}$ 的刚性转子在弱电场 $\boldsymbol{E}$ 中，(1) 忽略质心的运动，将转子的 Hamilton 量写为 H_0+H' 的形式. (2) 求出未受扰问题的精确解. 能级简并情况如何？(3) 用非简并态微扰论对所有能级计算最低阶修正. (4) 说明为什么可以使用非简并态微扰论，微扰后简并情况为何.

解　(1)
$$H=\frac{1}{2I}J^2-\boldsymbol{d}\cdot\boldsymbol{E}=\frac{1}{2I}J^2-dE\cos\theta$$

式中，$H_0=\frac{1}{2I}J^2$，$H'=-dE\cos\theta$.

(2) 本征函数为

$$\psi_{jm}=Y_{jm}(\theta,\varphi)$$

$m=-j,(-j+1),\cdots,(j-1),j$，为$2j+1$重简并.

(3) 一级修正

$$\langle jm|-dE\cos\theta|jm\rangle=-dE\langle jm|\cos\theta|jm\rangle=0$$

二级修正，由于

$$\langle j+1,m|-dE\cos\theta|jm\rangle=-dE\sqrt{\frac{(j+1-m)(j+1+m)}{(2j+1)(2j+3)}}$$

$$\langle j-1,m|-dE\cos\theta|jm\rangle=-dE\sqrt{\frac{(j+m)(j-m)}{(2j+1)(2j-1)}}$$

因此

$$E^{(2)}=\frac{2Id^2E^2}{\hbar^2}$$

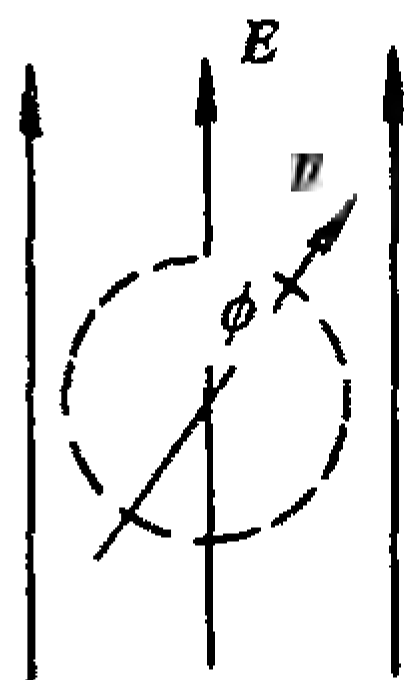
$$\times\left\{\frac{(j+1-m)(j+1+m)}{(2j+1)(2j+3)[j(j+1)-(j+1)(j+2)]}+\frac{(j+m)(j-m)}{(2j+1)(2j-1)[j(j+1)-j(j-1)]}\right\}$$

$$=\frac{Id^2E^2[j(j+1)-3m^3]}{\hbar^2 j(j+1)(2j-1)(2j+3)}$$

(4) 由于H'已经是在j子空间对角化的，因此可以使用非简并态微扰论. 微扰后简并没有完全消除，即j值相同而m值相反的那些态仍是简并的.

6.20　电偶极矩为$\boldsymbol{P}$的刚性转子在弱电场中的三个最低能级

题 6.20　一个具有电偶极矩P的刚性转子被限制在平面上转动(题图 6.20)转子对于固定转轴的惯量矩为I. 转动平面内有一均匀弱电场E. 精确到E^2时三个最低量子态的能量是多少?



题图 6.20

解　自由转子的 Hamilton 量为

$$H_0=\frac{1}{2I}L_\phi^2=-\frac{\hbar^2}{2I}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\phi^2}$$

其本征值和本征函数容易求出

$$E_m^{(0)}=\frac{\hbar^2m^2}{2I},\qquad \psi_m^{(0)}(\phi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{im\phi},\qquad m=0,\pm1,\pm2,\cdots$$

加上均匀电场$\boldsymbol{E}$后，转子与电场的作用能为

$$H'=-\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{P}=-EP\cos\phi=\lambda\cos\phi$$

因为电场很弱，可将它看成微扰.

微扰 Hamilton 量的矩阵元为

$$\langle n|H'|m\rangle = \frac{\lambda}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\phi e^{i(m-n)\phi}\cos\phi = \frac{\lambda}{2}(\delta_{n\,m+1}+\delta_{n\,m-1})$$

设

$$H_0|m\rangle = E_m^{(0)}|m\rangle$$

$$(H_0+H')|\ \rangle = E|\ \rangle$$

作展开

$$|\ \rangle = \sum_{m=-\infty}^{\infty} C_m|m\rangle$$

利用 H' 矩阵元表达式以及 $|m\rangle$ 的正交性，易得

$$(E-E_n^{(0)})C_n - \frac{\lambda}{2}C_{n-1} - \frac{\lambda}{2}C_{n+1} = 0$$

再设

$$E = \sum_{\rho=0}^{\infty} E^{(\rho)}\lambda^\rho, \qquad C_n = \sum_{\rho=0}^{\infty} C_n^{(\rho)}\lambda^\rho$$

则得各阶微扰方程

λ^0: $$(E^{(0)}-E_n^{(0)})C_n^{(0)} = 0$$

λ^1: $$(E^{(0)}-E_n^{(0)})C_n^{(1)} + E^{(1)}C_n^{(0)} - \frac{1}{2}C_{n-1}^{(0)} - \frac{1}{2}C_{n+1}^{(0)} = 0$$

λ^2: $$(E^{(0)}-E_n^{(0)})C_n^{(2)} + E^{(1)}C_n^{(1)} + E^{(2)}C_n^{(0)} - \frac{1}{2}C_{n-1}^{(1)} - \frac{1}{2}C_{n+1}^{(1)} = 0$$

⋮

假设考虑的能级为 $E_k^{(0)}$，则由零级方程得

$$C_n^{(0)} = a_k\delta_{n,k} + a_{-k}\delta_{n,-k}$$

上式代入一阶方程，得

$$(E_k^{(0)}-E_n^{(0)})C_n^{(1)} + E^{(1)}(a_k\delta_{n,k}+a_{-k}\delta_{n,-k})$$

$$-\frac{1}{2}(a_k\delta_{n-1,k}+a_{-k}\delta_{n-1,-k}+a_k\delta_{n+1,k}+a_{-k}\delta_{n+1,-k}) = 0$$

$n=\pm k$ 时得出

$$E^{(1)} = 0$$

$n\neq\pm k$ 时得出

$$C_n^{(1)} = -\frac{1}{2}\cdot\frac{1}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}\left(a_k\delta_{n-1,k}+a_{-k}\delta_{n-1,-k}+a_k\delta_{n+1,k}+a_{-k}\delta_{n+1,-k}\right)$$

$$= -\frac{1}{2}\cdot\frac{1}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}\left(C_{n-1}^{(0)}+C_{n+1}^{(0)}\right)$$

上式代入二级方程得

$$(E_k^{(0)} - E_n^{(0)})C_n^{(2)} + E^{(2)}C_n^{(0)} - \frac{1}{2}C_{n-1}^{(1)} - \frac{1}{2}C_{n+1}^{(1)} = 0$$

取 $n=k$，给出

$$E^{(2)}C_k^{(0)} = \frac{1}{2}(C_{k-1}^{(1)} + C_{k+1}^{(1)})$$

$$= \frac{1}{2}\left\{-\frac{1}{2}\cdot\frac{1}{E_{k-1}^{(0)} - E_k^{(0)}}(C_{k-2}^{(0)} + C_k^{(0)}) - \frac{1}{2}\cdot\frac{1}{E_{k+1}^{(0)} - E_k^{(0)}}(C_k^{(0)} + C_{k+2}^{(0)})\right\}$$

$$= -\frac{1}{4}\left\{\frac{1}{E_{k-1}^{(0)} - E_k^{(0)}}(C_{k-2}^{(0)} + C_k^{(0)}) + \frac{1}{E_{k+2}^{(0)} + E_k^{(0)}}(C_k^{(0)} + C_{k+2}^{(0)})\right\}$$

对于基态，$k=0,\ C_0^{(0)} \neq 0$，有

$$C_{-2}^{(0)} = C_2^{(0)} = 0$$

$$E^{(2)}C_0^{(0)} = -\frac{1}{4}\left\{\frac{1}{E_{-1}^{(0)} - E_0^{(0)}} + \frac{1}{E_1^{(0)} - E_0^{(0)}}\right\}C_0^{(0)}$$

所以

$$E_0^{(2)} = -\frac{1}{2}\cdot\frac{1}{E_1^{(0)} - E_0^{(0)}} = -\frac{I}{\hbar^2}$$

对于第一激发态，$k=\pm 1,\ C_{\pm 1}^{(0)} \neq 0$，有

$$E^{(2)}C_1^{(0)} = -\frac{1}{4}\left\{\frac{1}{E_0^{(0)} - E_1^{(0)}}(C_{-1}^{(0)} + C_1^{(0)}) + \frac{1}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}}(C_1^{(0)} + C_3^{(0)})\right\}$$

$$= -\frac{1}{4}\left\{\left(\frac{1}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} - \frac{1}{E_1^{(0)}}\right)C_1^{(0)} - \frac{1}{E_1^{(0)}}C_{-1}^{(0)}\right\}$$

$$E^{(2)}C_{-1}^{(0)} = -\frac{1}{4}\left\{-\frac{1}{E_{-1}^{(0)}}C_1^{(0)} + \left(\frac{1}{E_{-2}^{(0)} - E_{-1}^{(0)}} - \frac{1}{E_{-1}^{(0)}}\right)C_{-1}^{(0)}\right\}$$

$$= -\frac{1}{4}\left\{-\frac{1}{E_1^{(0)}}C_1^{(0)} + \left(\frac{1}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} - \frac{1}{E_1^{(0)}}\right)C_{-1}^{(0)}\right\}$$

这样得方程

$$\left[-\frac{1}{4}\left(\frac{1}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} - \frac{1}{E_1^{(0)}}\right) - E^{(2)}\right]C_1^{(0)} + \frac{1}{4}\cdot\frac{1}{E_1^{(0)}}C_{-1}^{(0)} = 0$$

$$\frac{1}{4}\cdot\frac{1}{E_1^{(0)}}C_1^{(0)} + \left[-\frac{1}{4}\left(\frac{1}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} - \frac{1}{E_1^{(0)}}\right) - E^{(2)}\right]C_{-1}^{(0)} = 0$$

解久期方程，得

$$E_{1+}^{(2)}=\frac{1}{4}\cdot\frac{1}{E_1^{(0)}}-\frac{1}{4}\left(\frac{1}{E_2^{(0)}-E_1^{(0)}}-\frac{1}{E_1^{(0)}}\right)=\frac{5I}{6\hbar^2}$$

$$E_{1-}^{(2)}=-\frac{1}{4}\cdot\frac{1}{E_1^{(0)}}-\frac{1}{4}\left(\frac{1}{E_2^{(0)}-E_1^{(0)}}-\frac{1}{E_1^{(0)}}\right)=-\frac{I}{6\hbar^2}$$

对于第二激发态，$k=\pm2$, $C_{\pm2}^{(0)}\neq0$，有

$$E^{(2)}C_{\pm2}^{(0)}=-\frac{1}{4}\left(\frac{1}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}+\frac{1}{E_3^{(0)}-E_2^{(0)}}\right)C_{\pm2}^{(0)}$$

所以

$$E_2^{(2)}=-\frac{1}{4}\left(\frac{1}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}+\frac{1}{E_3^{(0)}-E_2^{(0)}}\right)=\frac{I}{15\hbar^2}$$

于是，修正到二阶的结果如下：

基态

$$E_0=\lambda^2E_0^{(2)}=-\frac{I(Ep)^2}{\hbar^2}$$

第一激发态

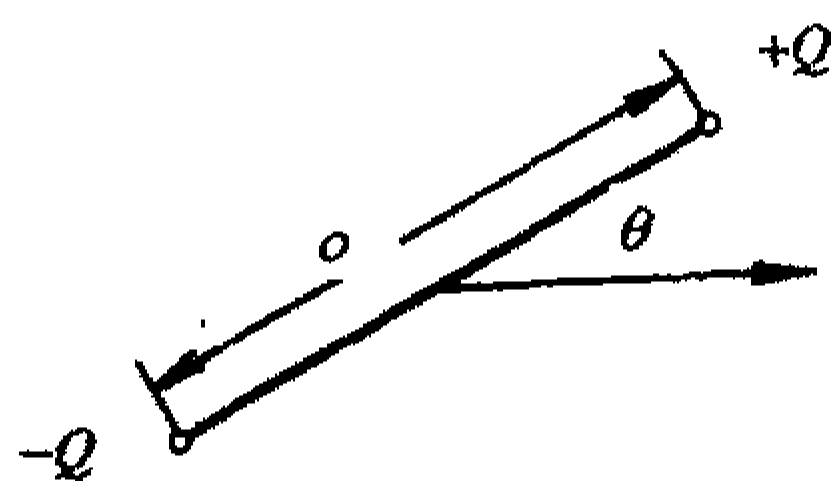
$$E_{1+}=\frac{\hbar^2}{2I}+\frac{5}{6}\cdot\frac{I(Ep)^2}{\hbar^2},\qquad E_{1-}=\frac{\hbar^2}{2I}-\frac{1}{6}\cdot\frac{I(Ep)^2}{\hbar^2}$$

第二激发态

$$E_2=\frac{2\hbar^2}{I}+\frac{1}{15}\cdot\frac{I(Ep)^2}{\hbar^2}$$

6.21　两端带电均匀棒的转动能级，本征函数及其在电场中的能量修正

题 6.21　一条长度为 d 质量均匀分布的棒可绕其中心在一平面内转动. 棒的质量为 M，在棒的每一端上分别有电荷 $+Q$ 及 $-Q$ 如题图 6.21 所示. (1) 用量子力学处理该系统，写出其 Hamilton 量、本征函数及其本征值. (2) 如果在转动平面内存在一电场强度为 $\boldsymbol{E}$ 的弱电场，这时的本征函数及能量如何(只精确到 E^1). (3) 如果这个电场很强，求基态的近似波函数及其能量值.



题图 6.21

解　(1) 该系统的 Hamilton 量为

$$H=-\frac{\hbar^2}{2I}\cdot\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}$$

式中，$I=\frac{1}{12}Md^2$，θ 是棒与平面内 x 轴的夹角，如题图 6.21 所示.

本征方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2I}\cdot\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\psi_m(\theta)=E_m\psi_m(\theta)$$

解此方程有

$$\psi_m(\theta) = C\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_m\theta}$$

其中$k_m^2 = \dfrac{2IE_m}{\hbar^2}$. 利用边界条件$\psi_m(\theta+2\pi) = \psi_m(\theta)$，有

$$k_m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$$

再利用归一化条件有

$$C^2 \cdot 2\pi = 1, \qquad C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

得本征函数$\psi_m(\theta) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_m\theta}$，$k_m = 0, \pm1, \pm2$. 本征值

$$E_m = \frac{\hbar^2}{2I}k_m^2 = \frac{6\hbar^2}{Md^2}k_m^2$$

(2) 不失一般性，可设此电场$\boldsymbol{E} = E\boldsymbol{e}_x$，这样 Hamilton 量为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2I} \cdot \frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + V(\theta)$$

式中

$$V = -\boldsymbol{P} \cdot \boldsymbol{E} = -Q\mathrm{d}E\cos\theta$$

将$V(\theta)$看成微扰项$H_1 = -QdE\cos\theta$

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2I} \cdot \frac{\partial^2}{\partial\theta^2}$$

未受微扰的本征函数及本征值为

$$\psi_m(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\theta}, \qquad E_m = \frac{\hbar^2}{2I}m^2 = \frac{6\hbar^2}{Md^2}m^2, \qquad m = 0, \pm1, \pm2, \cdots$$

利用一级微扰论，虽然$\psi_m(\theta)$及$\psi_{-m}(\theta)$是简并的，但是我们有

$$\langle -m | V(\theta) | m \rangle = \int_0^{2\pi} (-Q\mathrm{d}E)\cos\theta \cdot \frac{1}{2\pi}\mathrm{e}^{2\mathrm{i}m\theta}\mathrm{d}\theta = 0$$

所以仍可以用非简并理论

$$E_m^{(1)} = \langle m | H_1 | m \rangle = \int_0^{2\pi} (-Q\mathrm{d}E)\cos\theta \cdot \frac{1}{2\pi}\mathrm{d}\theta = 0$$

$$\psi_m^{(1)} = \sum_n{}' \frac{\langle n|H_1|m\rangle}{E_m^0 - E_n^0}$$

$$\langle n | H_1 | m \rangle = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} (-Q\mathrm{d}E)\cos\theta \cdot \mathrm{e}^{\mathrm{i}(m-n)\theta}\mathrm{d}\theta$$

$$= \frac{1}{2\pi}(-Q\mathrm{d}E)\frac{1}{2} \cdot 2\pi \cdot \left[\delta_{m-n+1,0} + \delta_{m-n-1,0}\right]$$

$$= -\frac{1}{2}Q\mathrm{d}E\left[\delta_{m-n+1,0} + \delta_{m-n-1,0}\right]$$

所以

$$\psi_m^{(1)}=\frac{Md^3QE}{12\hbar^2}\cdot\frac{1}{2m+1}\cdot\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m+1)\theta}-\frac{Md^3QE}{12\hbar^2}\cdot\frac{1}{1-2m}\cdot\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m-1)\theta}$$

$$=\frac{Md^3QE}{12\hbar^2\sqrt{2\pi}}\cdot\left[\frac{1}{2m+1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m+1)\theta}-\frac{1}{1-2m}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m-1)\theta}\right]$$

在准确到 E^1 时

$$E_m=\frac{6\hbar^2}{Md^2}m^2$$

$$\psi_m=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\theta}+\frac{Md^3QE}{12\hbar^2\sqrt{2\pi}}\cdot\left[\frac{1}{2m+1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m+1)\theta}-\frac{1}{1-2m}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m-1)\theta}\right]$$

(3) 若电场很强，这时 θ 必定在小角度范围内的概率大. 因而近似地有 $\cos\theta\approx 1-\frac{1}{2}\theta^2$，代入(2)中的 Hamilton 量中

$$H=-\frac{\hbar^2}{2I}\cdot\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+(-QdE)\left(1-\frac{1}{2}\theta^2\right)$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2I}\cdot\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\frac{1}{2}QdE\theta^2-QdE$$

这类似于一个简谐振子方程，对基态有

$$E_0=-QdE+\frac{1}{2}\hbar\sqrt{\frac{QEd}{I}}=-QdE+\hbar\sqrt{\frac{3QE}{Md}}$$

$$\psi_0=\frac{1}{\sqrt[4]{\pi}}\sqrt[8]{\frac{QEdI}{\hbar^2}}\exp\left(-\frac{\sqrt{QEdI}}{2\hbar}\theta^2\right)$$

6.22　对称陀螺的能级及稍不对称时能级的修正

题 6.22　(1) 给出惯量主矩为 $I_1=I_2=I\neq I_3$ 的对称陀螺的所有能级，(2) 一个稍不对称的陀螺没有两个 I 是精确相等的，但 $I_1-I_2=\Delta\neq 0$，$I_1+I_2=2I$，$\Delta/2I\ll 1$. 计算 $J=0$ 和 $J=1$ 能量到 $O(\Delta)$ 量级.

解　(1) 令 (x,y,z) 为一附着于陀螺上的转动坐标系，体系的 Hamilton 量为

$$H=\frac{1}{2}\left(\frac{J_x^2}{I_1}+\frac{J_y^2}{I_2}+\frac{J_z^2}{I_3}\right)=\frac{1}{2I}(J_x^2+J_y^2)+\frac{1}{2I_3}J_z^2$$

$$=\frac{1}{2I}J^2+\frac{1}{2}\left(\frac{1}{I_3}-\frac{1}{I}\right)J_z^2$$

于是具有确定 J，m 值的态的能量为

$$E=\frac{\hbar^2}{2I}J(J+1)+\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{I_3}-\frac{1}{I}\right)m^2$$

这就是对称陀螺的能级.

(2) 此时体系的 Hamilton 量为

$$H=\frac{1}{2I}J^2+\frac{1}{2}\left(\frac{1}{I_3}-\frac{1}{I}\right)J_z^2+\frac{\Delta}{4I^2}(J_y^2-J_x^2)=H_0+H'$$

$$H'=\frac{\Delta}{4I^2}(J_y^2-J_x^2)$$

注意到

$$J_x^2-J_y^2=\frac{1}{2}(J_+^2+J_-^2)$$

$$J_+^2|1,-1\rangle=2\hbar^2|11\rangle$$

$$J_-^2|11\rangle=2\hbar^2|1-1\rangle$$

其余为 0.

对于 H_0，可直接利用(1)中本征能量的计算结果，于是我们可计算微扰：

i) $J=0$. 无简并 $m=0$

$$E'_{00}=E_{00}+\langle 00|H'|00\rangle=E_{00}=0$$

ii) $J=1$. $m=0$ 不简并

$$E'_{10}=E_{10}+\langle 10|H'|10\rangle=E_{10}=\frac{\hbar^2}{I}$$

iii) $J=1$. $m=\pm1$. 二重简并，久期方程为

$$\begin{vmatrix}\lambda & -\frac{\Delta\hbar^2}{4I^2}\\ -\frac{\Delta\hbar^2}{4I^2} & \lambda\end{vmatrix}=0,\qquad \lambda_\pm=\pm\frac{\Delta\hbar^2}{4I^2}$$

所以 $E_{1\pm1}$ 分解成两条

$$E_{1\pm1}^{(\pm)}=\frac{\hbar^2}{2I}+\frac{\hbar^2}{2I_3}\pm\frac{\Delta\hbar^2}{4I^2}$$

6.23 用微扰论与变分法分别计算氦原子的电离能

题 6.23 (1) 对每个电子用简单的类氢波函数，按微扰论计算与电子-电子 Coulomb 相互作用相应的氦原子基态能量(忽略交换效应)，由此估计氦的电离能. (2) 以类氢波函数中的有效电荷作为变分参量，用变分法计算氦的电离能. 将(1)和(2)的结果与电离能实验值 $1.807E_0$. 作比较，其中 $E_0=\frac{1}{2}\alpha^2mc^2$.

注 $\psi_{1s}(r)=\sqrt{\frac{z^3}{\pi a_0^3}}\exp\left(-\frac{zr}{a_0}\right)$, $a_0=\frac{\hbar^2}{me^2}$; $\iint\frac{d^3r_1d^3r_2e^{-\alpha(r_1+r_2)}}{|r_1-r_2|}=\frac{20\pi^2}{\alpha^5}$

解　(1) 体系的波函数为$\left(H_0=-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_2^1+\nabla_2^2)-\frac{ze^2}{r_1}-\frac{ze^2}{r_2}\right)$

$$\Phi=\phi(r_1,r_2)\chi_0(s_{1z},s_{2z})$$

基态为

$$\phi(r_1,r_2)=\psi_{100}(r_1)\psi_{100}(r_2)$$

$$\psi_{100}(r)=\sqrt{\frac{z^3}{\pi a_0^3}}\exp\left(\frac{-zr}{a_0}\right),\qquad a_0=\frac{\hbar^2}{me^2}$$

$$\Delta E=\langle H'\rangle=e^2\iint \mathrm{d}^3r_1\mathrm{d}^3r_2\frac{|\psi_{100}(r_1)|^2|\psi_{100}(r_2)|^2}{|r_1-r_2|}$$

$$=e^2\left(\frac{z^3}{\pi a_0^3}\right)^2\iint \mathrm{d}^3r_1\mathrm{d}^3r_2\frac{\exp[-2z(r_1+r_2)/a_0]}{|r_1-r_2|}$$

$$=e^2\left(\frac{z^3}{\pi a_0^3}\right)^2\cdot\frac{20\pi^2}{(2z/a_0)^5}=\frac{5ze^2}{8a_0}$$

类氢原子的能级公式为

$$E_n=-\frac{e^2}{2a_0}\cdot\frac{z^2}{n^2}$$

系统基态能量为

$$E_0=-2\frac{e^2z^2}{2a_0}=-\frac{e^2z^2}{a_0},\qquad \text{未计 Coulomb 相互作用}$$

微扰基态能量为

$$E=-\frac{e^2z^2}{a_0}+\frac{5ze^2}{8a_0},\qquad z=2$$

所以

$$E=-\frac{11e^2}{4a_0}$$

按电离能定义

$$I=-\frac{e^2z^2}{2a_0}-\left(-\frac{e^2z^2}{a_0}+\frac{5ze^2}{8a_0}\right)=\frac{e^2z^2}{2a_0}-\frac{5ze^2}{8a_0},\qquad \text{He: } z=2$$

得

$$I=\frac{3e^2}{4a_0}=1.5E_0,\qquad E_0=\frac{e^2}{2a_0}=\frac{1}{2}\alpha^2mc^2$$

(2) 氦原子的 Hamilton 量为

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2+\nabla_2^2)-\frac{ze^2}{r_1}-\frac{ze^2}{r_2}+\frac{e^2}{r_{12}}$$

取试探波函数为

$$\phi(r_1,r_2,\lambda)=\frac{\lambda^3}{\pi}\mathrm{e}^{-\lambda(r_1+r_2)}$$

注意到

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2-\frac{\lambda}{r}\right)u(r)=-\frac{\lambda^2}{2}u(r),\qquad u(r)=\mathrm{e}^{-\lambda r}$$

所以

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2-\frac{\lambda\hbar^2}{mr}\right)u(r)=-\frac{\hbar^2\lambda^2}{2m}u(r)$$

记 $ze^2-\frac{\lambda\hbar^2}{m}=\sigma$，则有

$$\overline{H}=\iint \mathrm{d}^3r_1\mathrm{d}^3r_2\Phi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2-\frac{ze^2}{r_1}-\frac{ze^2}{r_2}+\frac{e^2}{r_{12}}\right)\Phi$$

$$=\iint \mathrm{d}^3r_1\mathrm{d}^3r_2\Phi^*\left[-\frac{\hbar^2\lambda^2}{m}-\frac{\sigma}{r_1}-\frac{\sigma}{r_2}+\frac{e^2}{r_{12}}\right]\Phi$$

$$=-\frac{\hbar^2\lambda^2}{m}-\frac{2\sigma\lambda^3}{\pi}\int\frac{\mathrm{e}^{-2\lambda r_1}}{r_1}\mathrm{d}^3r_1+\frac{e^2\lambda^6}{\pi^2}\iint \mathrm{d}^3r_1\mathrm{d}^3r_2\frac{\mathrm{e}^{-2\lambda(r_1+r_2)}}{r_{12}}$$

由 $\int\frac{\mathrm{e}^{-2\lambda r_1}}{r_1}\mathrm{d}^3r_1=\frac{\pi}{\lambda^2}$，得

$$\overline{H}=-\frac{\hbar^2\lambda^2}{m}-2\sigma\lambda+\frac{\lambda^6e^2}{\pi^2}\frac{20\pi^2}{(2\lambda)^5}$$

$\frac{\partial\overline{H}}{\partial\lambda}=0$，得

$$\lambda=\frac{m}{2\hbar^2}\left(2ze^2-\frac{5}{8}e^2\right)$$

基态能量

$$E=-\frac{\hbar^2\lambda^2}{m}-2\lambda\left(ze^2-ze^2+\frac{5e^2}{16}\right)+\frac{5e^2}{8}\lambda=-\frac{\hbar^2}{m}\lambda^2$$

$$=-\left(ze^2-\frac{5e^2}{16}\right)^2\frac{m}{\hbar^2}=-\frac{e^2}{a_0}\left(z-\frac{5}{16}\right)^2$$

$z=2$，得

$$E=-\frac{e^2}{a_0}\left(\frac{27}{16}\right)^2$$

$$I=-\frac{z^2e^2}{2a_0}+\frac{e^2}{a_0}\left(z-\frac{5}{16}\right)^2=\frac{e^2}{a_0}\left[\left(\frac{27}{16}\right)^2-2\right]=1.695E_0$$

可见，变分法所得的结果更符合实验值.

6.24 粒子在周期势 $V=V_0\cos\left(\dfrac{2\pi x}{a}\right)$ 中的本征态及 V_0 很小时的能量本征值

题 6.24 一个质量为 m 的粒子在周期势

$$V(x)=V_0\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)$$

中作一维运动. 已知能量本征态可以分成用角度 θ 表征的类. 角 θ 表征的类中波函数 $\psi(x)$ 对全体 x 满足关系

$$\psi(x+a)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\psi(x)$$

对于 $\theta=\pi$ 的类, 这一关系变成 $\psi(x+a)=-\psi(x)$ (反周期性). (1) 即使 $V_0=0$, 我们仍可按 θ 对本征态进行分类. k 取什么值时, 平面波 $\psi(x)=\mathrm{e}^{ikx}$ 满足周期为 a 的反周期条件? $V_0=0$ 时 $\theta=\pi$ 的类的能谱是什么? (2) V_0 很小时 $(V_0\ll(\hbar^2/ma^2)$, 用一级微扰论计算最低的两个能量本征值.

解 (1) 对于平面波 e^{ikx}, 注意到

$$\psi(x+a)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x+a)}=\mathrm{e}^{ika}\psi(x)$$

所以, 当 k 满足

$$ka=(2n+1)\pi,\qquad n=0,\pm1,\pm2,\cdots$$

时, 平面波 e^{ikx} 满足周期条件

$$\psi(x+a)=-\psi(x)$$

相应的能谱为

$$E_n=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(2n+1)^2,\qquad n=0,\pm1,\pm2,\cdots$$

(2) 当 $V_0\ll\hbar^2/ma^2$ 时, 微扰 Hamilton 量为

$$H'=V_0\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)$$

对于基态, 自由 Hamilton 量的本征值和本征函数为 $(n=0,-1)$

$$E_{0,-1}^{(0)}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2},\qquad \psi_0^{(0)}(x)=\frac{1}{\sqrt{a}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi x/a},\qquad \psi_{-1}^{0}(x)=\frac{1}{\sqrt{a}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi x/a}$$

于是, 有(在基态的表象中)

$$H'=\begin{pmatrix}0 & \dfrac{V_0}{2}\\ \dfrac{V_0}{2} & 0\end{pmatrix}=\frac{V_0}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$$

求其本征值, 得到能级的一阶修正

$$E^{(1)}=\pm\frac{V_0}{2}$$

所以, 基态能级在加上微扰后分裂成两条

$$E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} - \frac{V_0}{2}, \qquad E_2 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} + \frac{V_0}{a}$$

这就是体系最低的两个能量本征值.

6.25 周期性边界条件下一维运动电子的定态及其在微扰 $V(x)=\varepsilon\cos qx$ 下的能量修正

题 6.25 一个作一维运动的电子具有周期性边界条件，即波函数在长度 L (L 很大)以外再生. (1) 这个自由粒子的 Hamilton 量是什么？什么是体系的定态？这些态的简并度是多少？(2) 加上一个微扰 $V(x)=\varepsilon\cos qx$，其中 $qL=2\pi N$ (N 是一个很大的整数)，对于动量为 $q/2$ 的电子重新计算能级和定态直到 ε 的一级项. (3) 对于你在(2)的解答中，计算直到 ε^2 级的能量修正. (4) 对于电子动量接近但不等于 $q/2$ 的情形，重复(2)(省略定态的计算).

解 (1) Hamilton 量为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$$

体系的定态为

$$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}, \qquad k = \frac{2\pi}{L}n, \qquad n = \pm1, \pm2, \cdots$$

所有的能级 $E^{(0)} = \dfrac{2\pi^2\hbar^2}{mL^2}n^2$ 都是二重简并的.

(2) 考虑到 N 很大，故 $\dfrac{q}{2} = \dfrac{\pi N}{L}$ 可认为是 Brillouin 区的中点，于是取组合后的基

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\cos\frac{qx}{2}$$

$$\psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{qx}{2}$$

得到微扰矩阵元为

$$\begin{pmatrix} \dfrac{\varepsilon}{2} & 0 \\ 0 & -\dfrac{\varepsilon}{2} \end{pmatrix}$$

一级能量修正为 $\pm\dfrac{\varepsilon}{2}$. 从而精确到一级的能量级及之相应的波函数为

$$E_1' = E_1^{(0)} + \Delta E_1^{(1)} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{q}{2}\right)^2 + \frac{\varepsilon}{2}, \qquad \psi_1'(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\cos\frac{qx}{2}$$

$$E_2' = E_2^{(0)} + \Delta E_2^{(1)} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{q}{2}\right)^2 - \frac{\varepsilon}{2}, \qquad \psi_2'(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{qx}{2}$$

(3) 精确到二级 (ε^2) 的能级可用非简并微扰求出

$$\Delta E_1^{(2)} = \sum_l{}' \frac{\left|\langle \psi_l' | V | \psi_1 \rangle\right|^2}{E_1' - E_l'}$$

$$\approx \sum_l{}' \frac{1}{E_1^{(0)} - E_l^{(0)}} \left[\left(\frac{2\varepsilon}{L} \int_0^L \sin k_l x \cos qx \cos \frac{qx}{2} \mathrm{d}x \right)^2 \right.$$

$$\left. + \left(\frac{2\varepsilon}{L} \int_0^L \cos k_l x \cos qx \cos \frac{qx}{2} \mathrm{d}x \right)^2 \right]$$

$$= \frac{\varepsilon^2 / 4}{\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{q}{2}\right)^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{3q}{2}\right)^2} = -\frac{m\varepsilon^2}{4\hbar^2 q^2}, \qquad k_1 > 0$$

$$\Delta E_2^{(2)} = \sum_l{}' \frac{\left|\langle \psi_l' | V | \psi_2' \rangle\right|^2}{E_2' - E_l'}$$

$$\approx \sum_l{}' \frac{1}{E_2 - E_l} \left[\left(\frac{2\varepsilon}{L} \int_0^L \sin k_l x \cos qx \sin \frac{q}{2} x \mathrm{d}x \right)^2 \right.$$

$$\left. + \left(\frac{2\varepsilon}{L} \int_0^L \cos k_l x \cos qx \sin \frac{q}{2} x \mathrm{d}x \right)^2 \right]$$

$$= \frac{\varepsilon^2 / 4}{\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{q}{2}\right)^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{3q}{2}\right)^2} = -\frac{m\varepsilon^2}{4\hbar^2 q^2}$$

所以

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{q}{2}\right)^2 + \frac{\varepsilon}{2} - \frac{m\varepsilon^2}{4\hbar^2 q^2}$$

$$E_2 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{q}{2}\right)^2 - \frac{\varepsilon}{2} - \frac{m\varepsilon^2}{4\hbar^2 q^2}$$

(4) 设动量为 $k = \pm\left(\frac{q}{2} + \Delta\right)$，取波函数为

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{q}{2} + \Delta\right)x, \qquad \psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{q}{2} + \Delta\right)x$$

则微扰矩阵为 0，从而能级的一级修正为 0.

6.26　带电谐振子在微电场中的能移及电偶极矩

题 6.26　考虑一个电子禁闭在势阱 $V(r) = \frac{1}{2}kx^2$ 下的一维运动，它同时受到微扰电场

$\boldsymbol{F} = F\hat{\boldsymbol{x}}$ 的作用. (1) 确定该系统由于电场所引起的能移. (2) 态 $|n\rangle$ 下系统偶极矩定义为 $P_n = -e\langle x \rangle_n$，其中 $\langle x \rangle_n$ 是 x 在态 $|n\rangle$ 中的期望值. 求有电场存在时系统的偶极矩.

解 (1) $H = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \dfrac{1}{2}kx^2 - qFx$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{1}{2}k\left(x - \frac{qE}{k}\right)^2 - \frac{q^2F^2}{2k}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla'^2 + \frac{1}{2}kx'^2 - \frac{q^2F^2}{2k}$$

式中，$x' = x - \dfrac{qF}{k}$.

因此能移为

$$E' = \frac{q^2F^2}{2k} = \frac{e^2F^2}{2k}$$

(2)

$$\langle x \rangle_n = \left\langle x' + \frac{qF}{k} \right\rangle = \langle x' \rangle + \left\langle \frac{qF}{k} \right\rangle = \frac{qF}{k}$$

所以偶极矩

$$\boldsymbol{P}_n = -e\frac{q\boldsymbol{F}}{k} = e^2\frac{\boldsymbol{F}}{k}, \qquad q = -e$$

6.27 求氢原子 1s，2p 态能级的 Lamb 位移

题 6.27 如果一个很小的带电均匀的小球置于静电势 $V(\boldsymbol{r})$ 中，它的势能为

$$U(\boldsymbol{r}) = V(\boldsymbol{r}) + \frac{r_0^2}{6}\nabla^2 V(\boldsymbol{r}) + \cdots$$

其中 $\boldsymbol{r}$ 是电荷中心位置，且 r_0 是其极小半径. “Lamb 位移”可以被认为是由于电子有这样的结构而对氢原子能级的小的修正. 如果 U 的 r_0^2 项被认为是对 Coulomb 项 $V(r) = e^2/r$ 的一个微扰，求：对氢原子的 1s，2p 能级的 Lamb 位移. 把你的结果表示成 r_0 及基本常数的形式.

未经微扰的波函数为

$$\psi_{1s}(\boldsymbol{r}) = 2a_B^{-3/2}\mathrm{e}^{-r/\varepsilon_B}Y_{00}$$

$$\psi_{2pm}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{24}}a_B^{-5/2}r\mathrm{e}^{-r/2\varepsilon_B}Y_{1m}$$

式中，$a_B = \dfrac{\hbar^2}{m_e e^2}$.

解 1s 态是非简并的，因而能量修正为

$$\Delta E = \langle 1s|H'|1s\rangle$$

但是

$$H' = \frac{r_0^2}{6}\nabla^2 V(r) = \frac{r_0^2}{6}(-e^2)\nabla^2 \frac{1}{r}$$

$$= \frac{r_0^2}{6}(-e^2)(-4\pi)\delta(r) = \frac{2\pi}{3} r_0^2 e^2 \delta(r)$$

代入上式

$$\Delta E = \int \mathrm{d}x \frac{2\pi}{3} r_0^2 e^2 \delta(r) \left|\psi_{1s}(x)\right|^2 = \frac{2\pi}{3} r_0^2 e^2 \left|\psi_{1s}(0)\right|^2$$

$$\left|\psi_{1s}(0)\right|^2 = \frac{1}{\pi a_B^3}$$

得

$$\Delta E = \frac{2}{3} \cdot \frac{r_0^2 e^2}{a_B^3}$$

由于 H' 是 $\delta(r)$ 函数，所以只有 $\psi(0) \neq 0$ 时，H' 才能起作用. 但是 $\psi_{2pm}(0) = 0$，所以 $\Delta E_{2pm} = 0$.

6.28 电子偶素 1s 基态中单态与三重态的能级差

题 6.28 电子偶素是将正电子作为核的“氢原子”. 在非相对论极限下，能级和波函数除了标度以外都和氢原子一样. (1) 用你对于氢原子的知识，写出电子偶素 1s 基态的归一化波函数. 用球坐标并以氢原子 Bohr 半径 a_0 作标度参数. (2) 以 a_0 为单位计算 1s 态半径的均方根值. 这是电子偶素半径或直径的物理估计吗? (3) 在 1s 态，电子偶素存在一个超精细相互作用

$$H_{\text{ing}} = -\frac{8\pi}{3} \boldsymbol{\mu}_e \cdot \boldsymbol{\mu}_p \delta(\boldsymbol{r})$$

式中，$\boldsymbol{\mu}_e$ 和 $\boldsymbol{\mu}_p$ 是电子和正电子的磁矩 $\left(\boldsymbol{\mu} = \frac{ge}{2mc}\boldsymbol{S}\right)$. 对于电子和正电子 $|g| = 2$. 用一阶微扰论计算基态中单态和三重态的能级差，确定哪个能级最低. 能移是多少 GHz. 求数值结果.

解 (1) 由于电子偶素中电子折合质量为 $\frac{m}{2}$，所以其基态波函数为

$$\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2} \mathrm{e}^{-r/2a_0}$$

式中，$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$ 为 Bohr 半径.

(2)
$$\left\langle r^2 \right\rangle = \int_0^\infty r^4 \frac{1}{8a_0^3\pi} \mathrm{e}^{-r/a_0} \mathrm{d}r = a_0^2 \int_0^\infty x^4 \frac{1}{8\pi} \mathrm{e}^{-x} \mathrm{d}x = \frac{3a_0^2}{\pi}$$

所以 $\sqrt{\left\langle r^2 \right\rangle} = \sqrt{\frac{3}{\pi}} a_0$，可作为电子偶素半径的物理估计.

(3) 加入自旋后，体系状态可由$|nlmSS_z\rangle$描述. S, S_z分别为总自旋及其z分量

$$\langle 100S'S'_z|H_{\text{int}}|100SS_z\rangle = \int d^3r\psi^*_{100}(r)\left(-\frac{8\pi}{3}\right)\delta(r)\psi_{100}(r)\ \chi^\dagger_{s'}(S'_z)\boldsymbol{\mu}_e\cdot\boldsymbol{\mu}_p\chi_s(S_z)$$

$$= \frac{8\pi}{3}\left(\frac{e}{mc}\right)^2|\psi_{100}(0)|^2\ \chi^\dagger_{s'}(S'_z)\boldsymbol{S}_e\cdot\boldsymbol{S}_p\chi_s(S_z)$$

$$= \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2\cdot\frac{e^2}{a_0}\cdot\frac{1}{3}\left[\frac{1}{2}S(S+1)-\frac{3}{4}\right]\delta_{ss'}\delta_{s_zs'_z}$$

单态，$S=0,\ S_z=0$

$$\Delta E_0 = -\frac{1}{4}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2\frac{e^2}{a_0} < 0$$

三重态，$S=1,\ S_z=0,\pm1$

$$\Delta E_1 = \frac{1}{12}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2\frac{e^2}{a_0} > 0$$

可知单态能级低. 能级劈裂为

$$\Delta E_0 = \frac{1}{3}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2\frac{e^2}{a_0} = 4.831\times10^{-4}\text{eV}$$

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = 1.170\times10^{11}\text{Hz} = 117.0\text{GHz}$$

6.29 氢原子结合能

题 6.29 将质子看作是半径为R的带电球壳. 用一阶微扰论，计算由于质子的非点性质引起的氢原子结合能的改变. 你的答案在物理上有意义吗？为什么？

注 整个问题中你都可以用$R\ll a_0$这一近似，其中a_0是Bohr半径.

解 如果质子是半径为R的带电球壳，则氢原子的势能为

$$V(r) = \begin{cases} -\dfrac{e^2}{R}, & 0\leqslant r\leqslant R \\ -\dfrac{e^2}{r}, & R\leqslant r<\infty \end{cases}$$

$R\ll a_0$时，上述位势对点质子Coulomb势的偏离可以看成微扰

$$H' = \begin{cases} \dfrac{e^2}{r}-\dfrac{e^2}{R}, & 0\leqslant r\leqslant R \\ 0 & R\leqslant r<\infty \end{cases}$$

由于微扰引起的基态能级改变为

$$\Delta E = \int_0^R \mathrm{d}r \left(\frac{e^2}{r} - \frac{e^2}{R} \right) r^2 R_{10}^2$$

$$= \frac{4}{a_0^3} \int_0^R \mathrm{d}r \left(\frac{e^2}{r} - \frac{e^2}{R} \right) r^2 \mathrm{e}^{-2r/a_0}$$

$$\approx \frac{4}{a_0^3} \int_0^R \mathrm{d}r \left(\frac{e^2}{r} - \frac{e^2}{R} \right) r^2 = \frac{2e^2 R^2}{3a_0^3}, \qquad R \ll a_0$$

注意到$\Delta E > 0$，所以氢原子基态能级增高，也就是说结合能减小. 从物理上看，如果将点质子模型和球壳质子模型作一比较，就会发现体系在后一种情形会附加一种排斥作用. 另一方面，氢原子体系是靠吸引力结合起来的，所以质子的非点性质实际上削弱了体系的吸引作用，结果势必降低体系结合能.

6.30　氢原子的 1s 态和 2p 态

题 6.30　假设原子核有非零半径$r_{\mathrm{p}} \approx 10^{-13}\mathrm{cm}$，且其电荷沿该尺寸均匀地分布. 求由于点电荷与此扩展电荷间差异导致的氢原子的 1s 态和 2p 态的能移.

解　在球内电子所受的力为

$$F = -e^2 \left(\frac{r}{r_{\mathrm{p}}} \right)^3 \frac{1}{r^2} e_r = -\frac{e^2}{r_{\mathrm{p}}^3} r e_r$$

所以电势为

$$V_1 = \frac{e^2}{2r_{\mathrm{p}}^3} r^2 + C, \qquad r \leqslant r_{\mathrm{p}}$$

$$V_2 = -\frac{e^2}{r}, \qquad r \geqslant r_{\mathrm{p}}$$

$$V_1(r_{\mathrm{p}}) = V_2(r_{\mathrm{p}})$$

得

$$C = -\frac{3}{2} \cdot \frac{e^2}{r_{\mathrm{p}}}$$

所以

$$V(r) = \begin{cases} -\dfrac{e^2}{r}, & r > r_{\mathrm{p}} \\ \dfrac{e^2}{2r_{\mathrm{p}}} \left[\left(\dfrac{r}{r_{\mathrm{p}}} \right)^2 - 3 \right], & r \leqslant r_{\mathrm{p}} \end{cases}$$

$$H = H_0 + H'$$

$$H' = \begin{cases} 0, & r > r_p \\ \dfrac{e^2}{2r_p}\left[\left(\dfrac{r}{r_p}\right)^2 + \dfrac{2r_p}{r} - 3\right], & r \leqslant r_p \end{cases}$$

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$$

所以

$$\begin{aligned}\langle nlm|H'|nlm\rangle &= \langle nl|H'|nl\rangle \\ &= \int_0^\infty R_{nl}^* R_{nl} H'(r) r^2 \mathrm{d}r \\ &= \int_0^{r_p} r^2 \mathrm{d}r R_{nl}^*(r) R_{nl}(r) \times \frac{e^2}{2r_p}\left[\left(\frac{r}{r_p}\right)^2 + \frac{2r_p}{r} - 3\right]\end{aligned}$$

$$R_{10} = \frac{2}{a^{3/2}} \mathrm{e}^{-r/a}, \qquad R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6}a^{3/2}} \times \frac{r}{a} \mathrm{e}^{-r/2a}$$

考虑到这里不过是一级微扰论，而H'又只在核子体积内起作用. $r_p \ll a$，这里 a 为 Bohr 半径. 所以计算中可略去径向波函数中的指数项即认为$\mathrm{e}^{-r/a} \approx 1$. 由此得 1s 态能移

$$E_{10} = \langle 10|H'|10\rangle \approx \frac{2e^2 r_0}{5a^3}$$

2p 态能移

$$E'_{21} = \langle 21|H'|21\rangle \approx \frac{e^2 r_0}{1120a^4}$$

6.31　原子中的电子能级

题 6.31　一原子具有电荷 Z 的核和一个电子，核半径为 R，核内电荷均匀分布. 我们要研究核的有限体积对电子能级的影响：(1) 计算考虑到核的有限体积时的势能. (2) 用微扰论计算 Pb^{228} 的 1s 态由于核的有限体积引起的能级移动. 假定 R 远小于 Bohr 半径，从而可以对波函数作近似. (3) 假定 $R = r_0 A^{1/3}$，$r_0 = 1.2\mathrm{fm}$，给出(2)数值答案，用cm^{-1}表示.

解　(1) 均匀带电球 R 的场强为

$$4\pi r^2 E = \begin{cases} 4\pi Q, & r \geqslant R \\ 4\pi\left(\dfrac{4\pi}{3} r^3 \rho\right) = 4\pi\left(\dfrac{r}{R}\right)^3 Q, & r < R \end{cases}$$

$$E = \begin{cases} \dfrac{Q}{r^2}, & r \geqslant R \\ \dfrac{rQ}{R^3}, & r < R \end{cases}$$

由于电子在这场中的势能为 $V=-\int_r^\infty eE\mathrm{d}r$，所以有限体积核的 Coulomb 势为

$$\begin{cases} -\dfrac{Ze^2}{r}, & r \geqslant R \\ -\dfrac{Ze^2}{2R}\left[1-\left(\dfrac{r}{R}\right)^2\right]-\dfrac{Ze^2}{R}=\dfrac{-Ze^2}{2R}\left[3-\left(\dfrac{r}{R}\right)^2\right], & r<R \end{cases}$$

(2)
$$V=V_0+V'$$

所以微扰为

$$V'=\begin{cases} 0, & r \geqslant R \\ \dfrac{Ze^2}{r}-\dfrac{Ze^2}{2R}\left[3-\left(\dfrac{r}{R}\right)^2\right], & r<R \end{cases}$$

$$\Delta E_{1s}=\langle 1s|V'|1s\rangle=\int_0^R|\psi_{1s}|^2 r^2\mathrm{d}r\cdot V'\cdot 4\pi$$

$$\approx 4\pi|\psi_{1s}(0)|^2\int_0^R V'r^2\mathrm{d}r \approx \frac{2}{5}\frac{Ze^2}{a}\left(\frac{R}{a}\right)^2$$

式中

$$a=\frac{\hbar^2}{m_e Ze^2}$$

(3) 令 $\hbar=e=m_e=1$，则

$$\Delta E_{1s}=\frac{2}{5}\cdot\frac{Z}{(1/Z^3)}\left(\frac{R}{a_0}\right)^2 \text{原子单位}=\frac{2}{5}Z^4A^{2/3}\left(\frac{r_0}{a_0}\right)^2 \text{原子单位}$$

$$=\frac{2}{5}\times 82^4\times 208^{2/3}\times\left(\frac{1.2}{0.53}\times 10^{-5}\right)^2\times 27.2\times\frac{1}{1.24}\times 10^4\,\mathrm{cm}^{-1}$$

$$\approx 7.14\times 10^4\,\mathrm{cm}^{-1}$$

6.32 核的有限大小效应对基态能量的影响

题 6.32 将铝原子 $(Z=13, A=27)$ 的电子只留一个. 其余全部去掉. 形成一个类氢原子. 考虑这样的类氢原子. 对于电子基态，计算核的有限大小的效应. 即计算将核视为点核和将核视为物理上真实大小时(假设核是均匀带电球)所对应的两种基态能量差. 分别用：(1) 电子伏特，(2) 这个原子的电离能的一个分数来表示所得结果.

解 对于球对称分布，显然在球外势为

$$V_1=-\frac{Ze^2}{r}, \qquad r>\rho, \qquad \rho \text{是核的半径}$$

在核内电子受力为

$$F = Ze^2\left(\frac{r}{\rho}\right)^3\frac{1}{r^2} = \frac{Ze^2 r}{\rho^3}$$

势为

$$V_2 = \frac{Ze^2}{2\rho^3}r^2 + C, \qquad C\text{是待定常数}$$

由势在核表面连续得

$$V_1(\rho) = V_2(\rho)$$

$$C = -\frac{3}{2}\cdot\frac{Ze^2}{\rho}$$

$$V(r) = \begin{cases} -\dfrac{Ze^2}{r}, & r > \rho \\ \dfrac{Ze^2}{2\rho}\left[\left(\dfrac{r}{\rho}\right)^2 - 3\right], & r < \rho \end{cases}$$

电子的 Hamilton 量为

$$H = \frac{p^2}{2m} + V_0(r) + H'$$

式中

$$\begin{cases} V_0(r) = -\dfrac{Ze^2}{r}, & +\infty > r > 0 \\ H' = \begin{cases} 0, & r > \rho \\ \dfrac{Ze^2}{2\rho}\left[\left(\dfrac{r}{\rho}\right)^2 + \dfrac{2\rho}{r} - 3\right], & r < \rho \end{cases} \end{cases}$$

所以

$$\langle 100|H'|100\rangle = \int_0^\infty r^2 \mathrm{d}r R_{10}^*(r)R_{10}(r)H'(r)$$

$$= \int_0^\rho r^2\mathrm{d}r R_{10}^2(r)\frac{Ze^2}{2\rho}\left[\left(\frac{r}{\rho}\right)^2 + \frac{2\rho}{r} - 3\right]$$

$$= \int_0^\rho \frac{Z^4e^2}{a^3}\mathrm{e}^{-2Zr/a}\left(\frac{1}{r} - \frac{3}{2\rho} + \frac{r^2}{2\rho^3}\right)4r^2\mathrm{d}r$$

式中，$a = \dfrac{\hbar^2}{me^2} = 5.3\times10^{-9}\,\mathrm{cm}$ 是 Bohr 半径. 因为 $\rho = r_0A^{1/3}$，$r_0 = 10^{-13}\,\mathrm{cm}$，而

$$\frac{Z\rho}{a} = \frac{r_0A^{1/3}Z}{a} \approx 0.74\times10^{-3} \ll 1$$

所以可取 $\mathrm{e}^{-2Zr/a}\approx 1$. 于是

$$\Delta E=\langle 100|H'|100\rangle$$

$$\approx\frac{4Z^4e^2}{a^3}\int_0^\rho\left(r-\frac{3r^2}{2\rho}+\frac{r^4}{2\rho^3}\right)\mathrm{d}r$$

$$=\frac{4Z^4e^2}{a^3}\left(\frac{\rho^2}{2}-\frac{\rho^3}{2\rho}+\frac{\rho^5}{10\rho^3}\right)$$

$$\approx\frac{2Z^4e^2\rho^2}{5a^3}=\frac{2}{5}\frac{e^2}{a}\cdot Z^4\left(\frac{\rho}{a}\right)^2$$

(1) 因为$e^2/2a=13.6\text{eV}$，所以

$$\Delta E=\frac{4}{5}\cdot 13.6\text{eV}\cdot Z^4\left(\frac{\rho}{a}\right)^2$$

$$=\frac{4}{5}\times 13.6\times(13)^4\times\left(\frac{10^{-13}27^{1/3}}{5.3\times10^{-9}}\right)^2\text{eV}\sim 1\times10^{-3}\text{eV}$$

(2) 因为$Z^2e^2/a=E_I$(电离能)，所以

$$\Delta E=\frac{2}{5}\cdot\frac{Z^2e^2}{a}Z^2\left(\frac{\rho}{a}\right)^2=\frac{2}{5}Z^2\left(\frac{\rho}{a}\right)^2E_I\approx 2\times10^{-7}E_I$$

6.33 π^+-μ^-原子的 1s、2p 态之间的能级差

题 6.33 为测量π介子的电磁半径，我们去研究$\pi^+(m_{\pi^+}=273.2m_e)$和$\mu^-(m_{\mu^-}=206.77m_e)$组成的原子的性质. 假定π介子的所有电荷均匀分布在半径$r_0=10^{-13}\text{cm}$的球壳上，μ是点粒子. 将势能表成点电荷的 Coulomb 势加上微扰势并用微扰论去计算 1s-2p 能量差Δ的移动的百分比数值(忽略自旋效应和 Lamb 移动)已知

$$a_0=\frac{\hbar^2}{me^2},\qquad R_{10}^{(1)}=\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}2\mathrm{e}^{-r/a_0}$$

$$R_{21}^{(1)}=\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2}\frac{r}{a_0}\cdot\frac{\mathrm{e}^{-r/2a_0}}{\sqrt{3}}$$

解

$$V'=\begin{cases}0, & r>R\\ \left(\dfrac{1}{r}-\dfrac{1}{R}\right)e^2, & r<R\end{cases}$$

令$\hbar=e=m\left(=\dfrac{m_{\pi^+}m_{\mu-}}{m_{\pi^+}+m_{\mu-}}\right)=1$. 于是

$$\Delta E = \langle \psi | V' | \psi \rangle = |\psi(0)|^2 \int \mathrm{d}^3 r V' = \frac{2\pi}{3} |\psi(0)|^2 R^2$$

所求的百分数为

$$\frac{\Delta E_{2p} - \Delta E_{1s}}{E_{2p} - E_{1s}} \approx -\frac{\Delta E_{1s}}{E_{2p} - E_{1s}} = -\frac{\frac{2\pi}{3} \cdot \frac{1}{\pi} \cdot \left(\frac{R}{a_0}\right)^2}{-\frac{1}{8} + \frac{1}{2}}$$

$$= -\frac{16}{9}\left(\frac{R}{a_0}\right)^2 \approx -\frac{16}{9}\left(\frac{10^{-13}}{5.3 \times 10^{-9} \times \frac{1}{118}}\right)^2$$

$$\approx -8.8 \times 10^{-6}$$

$$\left|\frac{\Delta E_{2p} - \Delta E_{1s}}{\Delta}\right| \approx 8.8 \times 10^{-4}\%$$

6.34 μ介子原子由于核体积的有限性产生的能移

题 6.34 μ介子原子由核和束缚在核外处于类氢轨道上的μ介子组成($m_\mu = 206 m_e$).由于核电荷分布于半径为 R 的区域内，相对于点状核，μ介子原子的能级有一移动. 有效 Coulomb 势近似为

$$V(r) = \begin{cases} -\dfrac{Ze^2}{r}, & r > R \\ -\dfrac{Ze^2}{R}\left(\dfrac{3}{2} - \dfrac{1}{2} \cdot \dfrac{r^2}{R^2}\right), & r < R \end{cases}$$

(1) 定性陈述μ介子原子 1s、2s、2p、3s、3p、3d 能级绝对移动和相对移动. 对这些移动的所有差异均给以物理解释. 画出这些态的微扰和未微扰能级图. (2) 考虑到核电荷分布非点状这一事实，给出 1s 态能量一级改变的表示式. (3) 假定 $R/a_\mu \ll 1$， a_μ 是μ介原子“Bohr 半径”，估计 2s-2p 的能量移动并证明这个移动给出 R 的一个度量. (4) 题(2)中的方法在什么情况下很可能不正确？这种方法是过高还是过低地估计了能量移动，给以物理解释.

有用的信息

$$\psi_{1s} = 2N_0 \mathrm{e}^{-r/a_\mu} Y_{00}(\theta,\varphi), \qquad N_0 = 1/a_\mu^2$$

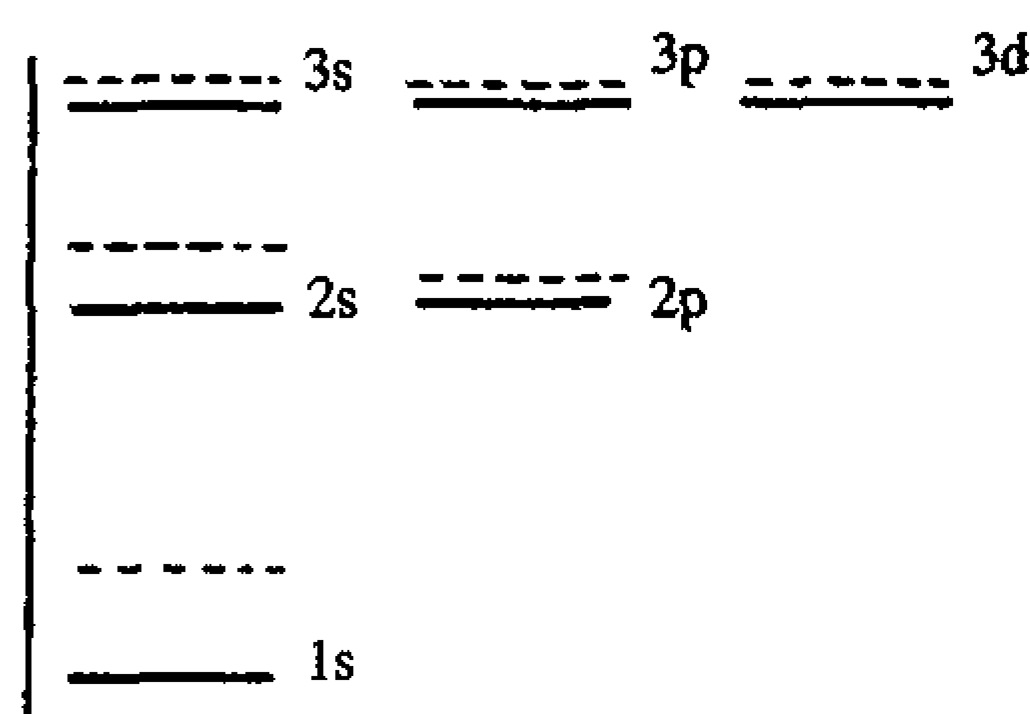
$$\psi_{2s} = \frac{1}{\sqrt{8}} N_0 \left(2 - \frac{1}{a_\mu}\right) \mathrm{e}^{-r/2a_\mu} Y_{00}(\theta,\varphi)$$

$$Y_{2p} = \frac{1}{\sqrt{24}} N_0 \frac{r}{a_\mu} \mathrm{e}^{-r/2a_\mu} Y_{1m}(\theta,\varphi)$$

解 (1) 微扰 Hamilton 量为

$$H'=\begin{cases}0, & r \geqslant R \\ Ze^2\left[\dfrac{1}{r}-\dfrac{1}{R}\left(\dfrac{3}{2}-\dfrac{1}{2}\dfrac{r^2}{R^2}\right)\right], & r \leqslant R\end{cases}$$

当$r<R$时，$H'>0$，故诸能级向上移动. 由于s态的μ介子在$r\sim 0$区域的概率较p态和d态的大,故s能级的移动较p和d能级的大. 此外，l量子数越大，对应轨道角动量越大，介子云分布越离开中心,对应的修正就越小. 如题图 6.34 所示，实线表示未扰动的能级，虚线表示微扰能级. d 能级的未微扰能级和微扰能级几乎一样.



题图 6.34

(2) 作为一级近似，1s 态能级移动为$\Delta E_{1s}=\langle 1s|H'|1s\rangle$. 由于$R\ll a_\mu$，可将在$\int_0^R$积分中的$|\psi(r)|^2$在$r=0$处抽出，于是

$$\Delta E_{1s}=\frac{2\pi}{5}Ze^2|\psi_{1s}(0)|^2R^2\approx\frac{2}{5}\left(\frac{R}{a_\mu}\right)^2\frac{Ze^2}{a_\mu}$$

(3) 同样

$$\Delta E_{2s}=\frac{2\pi}{5}Ze^2|\psi_{2s}(0)|^2R^2=\frac{1}{20}\cdot\frac{Ze^2}{a_\mu}\left(\frac{R}{a_\mu}\right)^2$$

$$\Delta E_{2p}\approx\frac{2}{5}Ze^2|\psi_{2p}(0)|^2R^2=0$$

所以

$$\Delta E_{2s}-\Delta E_{2p}=\Delta E_{2s}=\frac{1}{20}\cdot\frac{Ze^2}{a_\mu}\left(\frac{R}{a_\mu}\right)^2$$

$$=\frac{1}{20}\cdot\frac{Ze^2}{a_0}\left(\frac{R}{a_0}\right)^2\left(\frac{m_\mu}{m_e}\right)^3$$

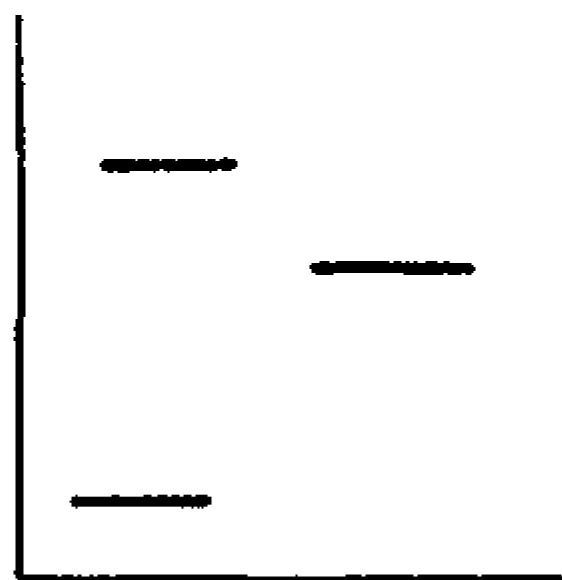
式中，a_0是氢原子的 Bohr 半径. 显然，由实验测得能级移动，即可得知R的数值. 若代以$Z=5,\ R=10^{-13}\text{cm}$，则

$$\Delta E_{2s}-\Delta E_{2p}\approx 2\times10^{-2}\text{eV}$$

(4) 上面(2)中的计算作了$R\ll a_\mu$的近似，当R不是远小于a_μ时，计算不正确. 这种方法过高地估计了 s 态的能量移动，因为将电子在核内的概率放大了(概率密度均取成$|\psi_{1s}(0)|^2$)，过低地估计了 p 态和 d 态的能量移动.

6.35　定性解释 Pauli 原理对能级的影响，给出氦原子态能级的微扰公式

题 6.35　(1) 对于氦原子基态和前两个激发态，用能级图给出它们的完全集量子数(总角动量，自旋，宇称). (2) 定性解释 Pauli 原理在决定能级次序时所起的作用. (3) 假设只有 Coulomb 力，并且知道 $Z=2$ 的类氢波函数标记为 $|1\mathrm{s}\rangle$，$|2\mathrm{s}\rangle$，$|2\mathrm{p}\rangle$ 等，以及与 $Z=2$ 相联系的类氢能量本征值为 $E_{1\mathrm{s}}$，$E_{2\mathrm{s}}$，$E_{2\mathrm{p}}$，…. 给出这些氦原子态能级的微扰公式，不要计算积分，但要仔细解释你表述的结论中的符号.



题图 6.35

解　(1) 如题图 6.35 所示.

(2)　Pauli 原理要求自旋对称的三重态，其空间波函数必是反对称的；而自旋反对称的单态，其空间波函数必是对称的. 后者的电子云重叠大，所以排斥能大($|r_1-r_2|$ 小)，即能级较高. 这就是 Pauli 原理在排斥时的作用.

(3) 氦原子的 Hamilton 量为

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2-\frac{2e^2}{r_1}-\frac{2e^2}{r_2}+\frac{e^2}{|r_1-r_2|}$$

对于 $|1\mathrm{s}1\mathrm{s}\rangle$ 态，微扰修正公式为

$$\Delta E_{1\mathrm{s}}=\left\langle 1\mathrm{s}1\mathrm{s}\left|\frac{e^2}{|r_1-r_2|}\right|1\mathrm{s}1\mathrm{s}\right\rangle$$

对于 $1\mathrm{s}nl$ (l 代表 s, p,…, $n=2,3,\cdots$)电子组态，有自旋三重态的微扰修正公式为

$$\Delta E_{nl}^{(3)}=\frac{1}{2}\left[\left(\langle 1\mathrm{s}nl|-\langle nl1\mathrm{s}|\right)\frac{e^2}{|r_1-r_2|}\left(|1\mathrm{s}nl\rangle-|nl1\mathrm{s}\rangle\right)\right]$$

$$=\frac{1}{2}\left\langle 1\mathrm{s}nl\left|\frac{e^2}{|r_1-r_2|}\right|1\mathrm{s}nl\right\rangle-\frac{1}{2}\left\langle nl1\mathrm{s}\left|\frac{e^2}{|r_1-r|_2}\right|1\mathrm{s}nl\right\rangle$$

$$-\frac{1}{2}\left\langle 1\mathrm{s}nl\left|\frac{e^2}{|r_1-r_2|}\right|nl1\mathrm{s}\right\rangle\mathrm{s}+\frac{1}{2}\left\langle nl1\mathrm{s}\left|\frac{e^2}{|r_1-r_2|}\right|nl1\mathrm{s}\right\rangle$$

$$=\left\langle 1\mathrm{s}nl\left|\frac{e^2}{|r_1-r_2|}\right|1\mathrm{s}nl\right\rangle-\left\langle 1\mathrm{s}nl\left|\frac{e^2}{|r_1-r_2|}\right|nl1\mathrm{s}\right\rangle$$

自旋单态的微扰修正公式为

$$\Delta E_{nl}^{(1)}=\left\langle 1\mathrm{s}nl\left|\frac{e^2}{|r_1-r_2|}\right|1\mathrm{s}nl\right\rangle+\left\langle 1\mathrm{s}nl\left|\frac{e^2}{|r_1-r_2|}\right|nl1\mathrm{s}\right\rangle$$

式中，$\left\langle 1\mathrm{s}nl\left|\frac{e^2}{|r_1-r_2|}\right|1\mathrm{s}nl\right\rangle$ 称为直接积分；$\left\langle 1\mathrm{s}nl\left|\frac{e^2}{|r_1-r_2|}\right|nl1\mathrm{s}\right\rangle$ 称为交换积分.

6.36　圆周运动的粒子在微扰势 $H' = A\sin\theta\cos\theta$ 下的最低两个态及其能量修正

题 6.36　质量为 m 的粒子约束在一半径为 a 的圆周上，除此之外它是自由的. 加一个微扰势 $H' = A\sin\theta\cos\theta$ (其中 θ 是圆周上的角位置). 对于能量为 $\dfrac{\hbar^2}{2ma^2}$ 的两个能量本征态求出修正后的零级波函数，并计算它们的微扰能量修正(精确到二级).

解　未微扰的波函数及能级为

$$\psi_n(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}n\theta}, \qquad n = \pm1, \pm2, \cdots$$

$$E_n = \frac{n^2\hbar^2}{2ma^2}$$

由此，我们只需考虑 $n = \pm1$ 的两个态，它们是简并的，微扰矩阵为

$$\begin{pmatrix} 0 & -\dfrac{\mathrm{i}A}{4} \\ \dfrac{\mathrm{i}A}{4} & 0 \end{pmatrix}$$

将它对角化得出两个零级波函数为

$$\psi_1' = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\mathrm{i}|1\rangle + |-1\rangle\right), \qquad \Delta E_1^{(1)} = -\frac{A}{4}$$

$$\psi_2' = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1\rangle - \mathrm{i}|-1\rangle\right), \qquad \Delta E_2^{(1)} = \frac{A}{4}$$

为了求二级能量修正，利用公式

$$\Delta E^{(2)} = \sum_n{}' \frac{\left|\langle\psi_k' \,|\, H' \,|\, n\rangle\right|^2}{E_k - E_n}$$

但是

$$H'|n\rangle = \frac{A}{2}\sin 2\theta|n\rangle = \frac{A}{4\mathrm{i}}|n+2\rangle - \frac{A}{4\mathrm{i}}|n-2\rangle$$

所以

$$\Delta E_1^{(2)} = \sum_n{}' \frac{\left|\langle\psi_1'|n+2\rangle - \langle\psi_1'|n-2\rangle\right|^2}{\dfrac{\hbar^2}{2ma^2}(1-n^2) + \dfrac{A}{4}} \times \left(\frac{A}{4}\right)^2$$

$$= \frac{\dfrac{1}{2}}{\dfrac{\hbar^2}{2ma^2}\left[1-(-3)^2\right] + \dfrac{A}{4}} \times \left(\frac{A}{4}\right)^2 + \frac{\dfrac{1}{2}}{\dfrac{\hbar^2}{2ma^2}(1-3^2) + \dfrac{A}{4}} \times \left(\frac{A}{4}\right)^2$$

$$\approx -\frac{ma^2A^2}{64\hbar^2}$$

同理，$\Delta E_2^{(2)} \approx -\dfrac{ma^2A^2}{64\hbar^2}$，从而

$$\begin{cases} E_1 = \dfrac{\hbar^2}{2ma^2} + \dfrac{A}{4} - \dfrac{ma^2A^2}{64\hbar^2} \\ E_2 = \dfrac{\hbar^2}{2ma^2} - \dfrac{A}{4} - \dfrac{ma^2A^2}{64\hbar^2} \end{cases}$$

6.37 电子在 $V(x) = -\dfrac{k}{x}$，$x>0$；$V(x)=\infty$，$x\leqslant 0$ 势中的基态能级，及基态能量的 Stark 移动

题 6.37 距离液氦表面 x 处的一个电子受到以下势的作用

$$\begin{cases} V(x) = -\dfrac{k}{x}, & x>0, \quad k=\text{常数} \\ V(x)=\infty, & x\leqslant 0 \end{cases}$$

(1) 求出基态能级. 略去自旋的影响. (2) 运用一级微扰理论计算基态的 Stark 移动.

解 (1) 当 $x\leqslant 0$ 时，波函数 $\psi(x)=0$，当 $x>0$ 时，Schrödinger 方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \left(-\frac{k}{x}\right)\right]\psi(x) = E\psi(x) \tag{1}$$

注意到氢原子的径向波函数 $R(r)$ 满足方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{1}{r^2}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r)\right]R = ER$$

若以 $R(r)=\chi(r)/r$ 代换，且取 $l=0$，则

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} - \frac{e^2}{r}\right)\chi(r) = E\chi(r) \tag{2}$$

方程(1)、(2)形式相同，且具有相同的边界条件，所以它们的解应该相同.

从氢原子基态能量

$$E_{10} = -\frac{me^4}{2\hbar^2}$$

及基态波函数

$$\chi_{10}(r) = \frac{2}{a_0^{3/2}} r\mathrm{e}^{-r/a_0}, \qquad a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

可以得到所求的基态能量及其波函数

$$E_1 = -\frac{mk^2}{2\hbar^2}$$

$$\psi_1(x) = \frac{2}{a^{3/2}} x\mathrm{e}^{-x/a}, \qquad a = \frac{\hbar^2}{mk}$$

(2) 微扰势为

$$V' = e\varepsilon_e x, \qquad \varepsilon_e \text{为电场强度}$$

于是基态的能级修正为

$$\Delta E_1 = \langle \psi_1 | V' | \psi_1 \rangle$$

$$= \int_0^\infty \frac{2}{a^{3/2}} x\mathrm{e}^{-x/a} \cdot e\varepsilon_e x \cdot \frac{2}{a^{3/2}} x\mathrm{e}^{-x/a} \mathrm{d}x$$

$$= \frac{3}{2} e\varepsilon a = \frac{3\hbar^2 e\varepsilon_e}{2mk}$$

6.38　讨论和计算氢原子基态的 Stark 效应

题 6.38　讨论和计算氢原子基态的 Stark 效应.

解　取外加均匀电场为 z 方向，对应的 Hamilton 量为

$$H_s = e\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{R} = e\varepsilon z$$

氢原子基态不存在简并，所以可应用定态微扰论，第一级效应为

$$E^{(1)} = \langle n=1, l=0, m=0 | e\varepsilon z | n=1, l=0, m=0 \rangle$$

对于氢原子，宇称为 $(-1)^l$ 基态是偶宇称，z 是奇宇称算符，所以 $E^{(1)}=0$. 进一步，第二级效应为

$$E^{(2)} = e^2\varepsilon^2 \sum_{\substack{n\neq 1\\ l,m}} \frac{|\langle 100 | z | nlm \rangle|^2}{E_1 - E_n}$$

因为

$$E_n = -\frac{E_I}{n^2}, \qquad E_I = \frac{e^2}{2a}$$

这里 a 为 Bohr 半径，所以

$$E_I - E_n < 0, \qquad n \neq 1$$

增加电场只是使氢原子的基态能级降低. 这里求和式不难进一步计算. 注意不为零的矩阵元为 $l=\pm 1$, $m=0$.

6.39　为何氢原子激发态有线性 Stark 效应，而钠原子激发态只有二次 Stark 效应

题 6.39　解释为何氢原子激发态在电场中有线性 Stark 效应，而钠原子激发态仅有二次 Stark 效应.

解　外电场对电子的作用能为

$$H' = e\boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{r}$$

从数学上可知，在 $\boldsymbol{r} \to -\boldsymbol{r}$ 交换下，积分值应不变. 即

$$\langle l' | H' | l \rangle (\boldsymbol{r}) = \langle l' | H' | l \rangle (-\boldsymbol{r})$$

$$= (-1)^{l'+l+1} \langle l' | H' | l \rangle (\boldsymbol{r})$$

容易看出，同宇称态有 $\langle l'|H'|l\rangle=0$.

只要电场不甚微小，可不考虑氢原子中电子的自旋所造成的精细结构. 这时，氢原子的激发态是不同宇称态的叠加态，即存在对 l 的简并. 利用简并微扰处理，由于存在不为零的微扰 Hamilton 量矩阵元，因此存在线性 Stark 效应.

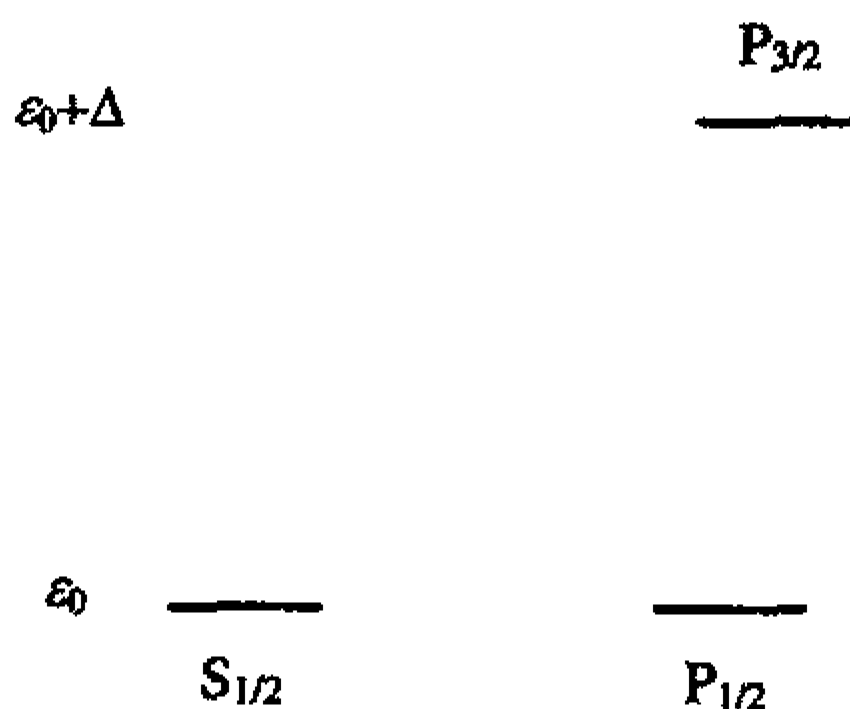
而对钠原子的激发态，每个能级的宇称是一定的(对 l 的简并已解除). 利用非简单并微扰处理. 能量一级修正

$$\langle l|H'|l\rangle=0$$

二级修正一般不为零. 所以，仅有二次 Stark 效应.

6.40 计算 Stark 效应引起的氢原子 $S_{1/2}$，$P_{1/2}$，$P_{3/2}$ 态的能级变化

题 6.40 Stark 效应 题图 6.40 中给出了氢原子的 $n=2$ 能级. $S_{1/2}$ 态和 $P_{1/2}$ 态是简并的，能量为 ε_0，$P_{3/2}$ 能量为 $\varepsilon_0+\Delta$. 加上均匀电场 E 后，能级变到 $\varepsilon_1,\varepsilon_2,\varepsilon_3$. 设其他能级距这三个能级很远，不需要考虑. 试决定 $\varepsilon_1,\varepsilon_2,\varepsilon_3$ 到 E 的二阶.



题图 6.40

解 按题意，假设微扰 Hamilton 量 $H'=-e\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{r}$ 在这三个能级间的矩阵元为

	$P_{3/2}$	$P_{1/2}$	$S_{1/2}$
$P_{3/2}$	0	0	b
$P_{1/2}$	0	0	a
$S_{1/2}$	b^*	a^*	0

其中已利用了 H' 在空间反演下变号这一事实.

这样，对 $P_{3/2}$ 能级来说

$$E_{P_{3/2}}=E^{(0)}_{P_{3/2}}+\frac{|\langle P_{3/2}|H'|S_{1/2}\rangle|^2}{E^{(0)}_{P_{3/2}}-E^{(0)}_{S_{1/2}}}$$

$$=\varepsilon_0+\Delta+\frac{|b|^2}{\Delta}$$

对 $P_{1/2}$ 和 $S_{1/2}$ 能级，首先要在它们张成的子空间内将其 Hamilton 量对角化，得到两个新能级

$$|1\rangle=\frac{a|P_{1/2}\rangle+|a||S_{1/2}\rangle}{\sqrt{2}|a|}$$

$$|2\rangle=\frac{a|P_{1/2}\rangle-|a||S_{1/2}\rangle}{\sqrt{2}|a|}$$

它们的能量为

$$E_1 = E_1^{(0)} + |a| + \frac{|\langle 1|H'|\mathrm{P}_{3/2}\rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_{\mathrm{P}3/2}^{(0)}}$$

$$= \varepsilon_0 + |a| + \frac{|b|^2}{2(-\Delta)} = \varepsilon_0 + |a| - \frac{|b|^2}{2\Delta}$$

$$E_2 = E_2^{(0)} - |a| + \frac{|\langle 2|H'|\mathrm{P}_{3/2}\rangle|^2}{E_2^{(0)} - E_{\mathrm{P}3/2}^{(0)}}$$

$$= \varepsilon_0 - |a| - \frac{|b|^2}{2\Delta}$$

6.41　说明普通原子与氢原子 Stark 效应的区别及四个氢原子态的 Stark 能移

题 6.41　通常观察到的原子中 Stark 效应(均匀电场产生的能级移动)与场强平方成正比. 解释为什么如此. 但对氢原子某些态 Stark 效应是场强的线性函数. 解释为什么. 用微扰计算说明氢原子基态与第一激发态的最低不为零 Stark 效应. 在精确到一个整体常数范围内，波函数为

$$\Psi_{100} = 4\sqrt{2a_0}\mathrm{e}^{-r/a_0}$$

$$\Psi_{200} = (2a_0 - r)\mathrm{e}^{-r/2a_0}$$

$$\Psi_{21\pm1} = \pm\frac{1}{\sqrt{2}} r\mathrm{e}^{-r/2a_0}\sin\theta\mathrm{e}^{\pm i\Phi}$$

$$\Psi_{210} = r\mathrm{e}^{-r/2a_0}\cos\theta$$

解　多电子原子系统偶极矩为

$$\boldsymbol{d} = -\sum_i e_i \boldsymbol{r}_i$$

对一般原子，除总角动量第三分量 l_z 简并外，无其他的能级简并，能量与 n, l 有关. 而

$$\langle nlm| -\boldsymbol{d}\cdot\boldsymbol{E} |nlm'\rangle = 0$$

因为微扰 $H' = -\boldsymbol{d}\cdot\boldsymbol{E}$ 是奇宇称算子，上面矩阵元仅在相异宇称态之间才不为 0. 所以对任一定态的平均值为 0，即一级微扰为 0. 因此一般原子需考虑二级修正，其能量正比于电场强度的平方 E^2.

对氢原子，存在着对同一主量子数 n 不同 l 的简并，这些态之间的矩阵元 $\langle nl|H'|nl\rangle$ 并不全为 0. 因此一级微扰下(简并微扰)能级位移不为 0，即氢原子的 Stark 效应是场强的线性函数.

微扰 Hamilton 量为

$$H' = eEz = eEr\cos\theta$$

基态非简并

$$\psi_{100} = 4\sqrt{2a_0}\mathrm{e}^{-r/a_0}$$

$$\langle 100|r\cos\theta|100\rangle = 0$$

其二级修正为

$$V^{(2)}=\sum{}'\frac{\left|H'_{n1}\right|^2}{E_1^{(0)}-E_n^{(0)}}$$

$$=e^2E^2\sum_{n=2}^{\infty}\frac{\left|\langle n10|z|100\rangle\right|^2}{1-\frac{1}{n^2}}\cdot\frac{2a}{e^2}$$

$$=2aE^2\cdot\frac{9}{8}a^2=\frac{9}{4}a^3E^2$$

第一激发态 $n=2$ 是 4 重简并

$$\psi_{200},\psi_{210},\psi_{21\pm1}$$

利用 Y_{1m} 的正交性得

$$H'_{12}=H'_{21}=-3eEa$$

其他为 0

$$H'-E^{(1)}I=\begin{pmatrix}-E^{(1)} & -3eEa & 0 & 0\\ -3eEa & -E^{(1)} & 0 & 0\\ 0 & 0 & -E^{(1)} & 0\\ 0 & 0 & 0 & -E^{(1)}\end{pmatrix}$$

由行列式非零解充要条件得能级修正为

$$E^{(1)}=\pm3eEa,0,0$$

故能级分裂为

$$-\frac{e^2}{2a}\cdot\frac{1}{2^2}+3eEa$$

$$-\frac{e^2}{8a}-3eEa$$



题图 6.41

a 为 Bohr 半径. 另有两个能级简并未消除(题图 6.41).

6.42　只剩一个电子的离子的 Zeeman 分裂与一阶 Stark 效应

题 6.42　考虑只剩一个单电子的电离原子 (z,A). 在“弱”磁场中计算 $n=2$ 的态的 Zeeman 分裂. (1) 对于电子进行计算. (2) 对于一个具有电子质量但假设自旋为 0 的粒子进行计算.

解　(1) 对于电子，当外加磁场为弱场时，与之相比，旋轨耦合就不能忽略，即为反常 Zeeman 效应. 此时 Hamilton 量为

$$H=\frac{p^2}{2m_e}-\frac{Ze^2}{r}+\frac{eB}{2m_ec}(l_z+2S_z)+\xi(r)s\cdot l$$

$$= H_0 + \frac{eB}{2m_e c} j_z + \frac{eB}{2m_e c} S_z$$

式中，$H_0 \equiv \frac{\boldsymbol{P}^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r} + \xi(r)\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{l}$；$j_z = l_z + S_z$.

设未加磁场时

$$H_0 \psi_{nljmj} = E_{nlj} \psi_{nljmj}, \qquad j = l \pm \frac{1}{2}$$

不考虑最后一项时，(l^2, j^2, j_z) 仍为守恒量，此时能量为

$$E_{nlj} + m_j \hbar \omega_L, \qquad \omega_L = \frac{eB}{2m_e c}$$

于是，在弱磁场下，最后一项的贡献可考虑为

$$\omega_L S_z = \frac{\hbar\omega_L}{2} \left\langle j m_j | \sigma_z | j m_j \right\rangle$$

$$= \begin{cases} \dfrac{m_j}{2j} \hbar \omega_L, & j = l + \dfrac{1}{2} \\[2ex] -\dfrac{m_j}{2j+2} \hbar \omega_L, & j = l - \dfrac{1}{2} \end{cases}$$

$$E_{nljm_j} = E_{nlj} + \begin{cases} \left(1 + \dfrac{1}{2j}\right) m_j \hbar \omega_L, & j = l + \dfrac{1}{2} \\[2ex] \left(1 + \dfrac{1}{2j+2}\right) m_j \hbar \omega_L, & j = l - \dfrac{1}{2} \end{cases}$$

对 $n = 2$，有

$$\begin{cases} E_{20\frac{1}{2}m_j} = E_{20\frac{1}{2}} + 2 m_j \hbar \omega_L, & m_j = \pm\dfrac{1}{2} \\[2ex] E_{21\frac{3}{2}m_j} = E_{21\frac{3}{2}} + \dfrac{4}{3} m_j \hbar \omega_L, & m_j = \pm\dfrac{3}{2}, \pm\dfrac{1}{2} \\[2ex] E_{21\frac{1}{2}m_j} = E_{21\frac{1}{2}} + \dfrac{2}{3} m_j \hbar \omega_L, & m_j = \pm\dfrac{1}{2} \end{cases}$$

(2) 自旋为 0 时，没有与自旋相关的效应，于是

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_e} + V(r) + \frac{eB}{2m_e c} l_z$$

本征函数为

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nlm}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

能量本征值为

$$E_{nlm} = E_{nl} + \frac{eB}{2m_e c} m\hbar$$

$n=2$

$$E_{200}=E_{20}$$

$$E_{21\pm1}=E_{21}\pm\frac{eB}{2m_e c}\hbar$$

$$E_{210}=E_{21}$$

6.43 用微扰论计算在弱电场时，氢原子$n=2$能级的简并消除与能移

题 6.43 Stark 通过实验表明：当外加一均匀弱电场时，氢原子的$n=2$，简并度为四的能级可以发生移动. 运用微扰论，忽略自旋和相对论效应，考察这个效应. 特别是(1) 各能级的能量的一级修正表达式是什么(不要求算出径向部分积分)? (2) 此时还有没有简并? (3) 画出$n=2$能级图. 要求能反映出能级在外加电场前后情况. 描述可观察到的起源于上述能级的谱线.

解 体系的 Hamilton 量

$$H=H_0+H'$$

式中

$$H_0=-\frac{e^2}{r}+\frac{L^2}{2mr^2}$$

$$H'=eEz,\qquad \text{取 } z \text{ 轴方向为均匀弱电场 } \boldsymbol{E} \text{ 的方向}$$

由题意，$H'\ll H_0$，可将H'当成微扰项.

对于氢原子$n=2$的四个简并能级. 我们可用量子数(l,m)表示为$(0,0),(2,0),(1,1),(1,-1)$. 在上四基矢张成的子空间中，$\boldsymbol{H}'$的矩阵表示为

$$H'=\begin{pmatrix} 0 & \langle 00|H'|10\rangle & 0 & 0 \\ \langle 10|H'|00\rangle & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

式中

$$\begin{aligned}\langle 1,0|H'|0,0\rangle&=\langle 0,0|H'|1,0\rangle^*\\&=eE\int u_{210}^*(r)r\cos\theta u_{200}(r)\mathrm{d}^3r\\&=-3eEa_0,\qquad a_0\text{ 为 Bohr 半径}\end{aligned}$$

解久期方程

$$\begin{vmatrix} -w_1 & \langle 00|H'|10\rangle & 0 & 0 \\ \langle 10|H'|00\rangle & -w_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -w_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -w_1 \end{vmatrix}=0$$

可得

$$w_1^{(1)} = 3eEa_0$$

$$w_1^{(2)} = w_1^{(3)} = 0$$

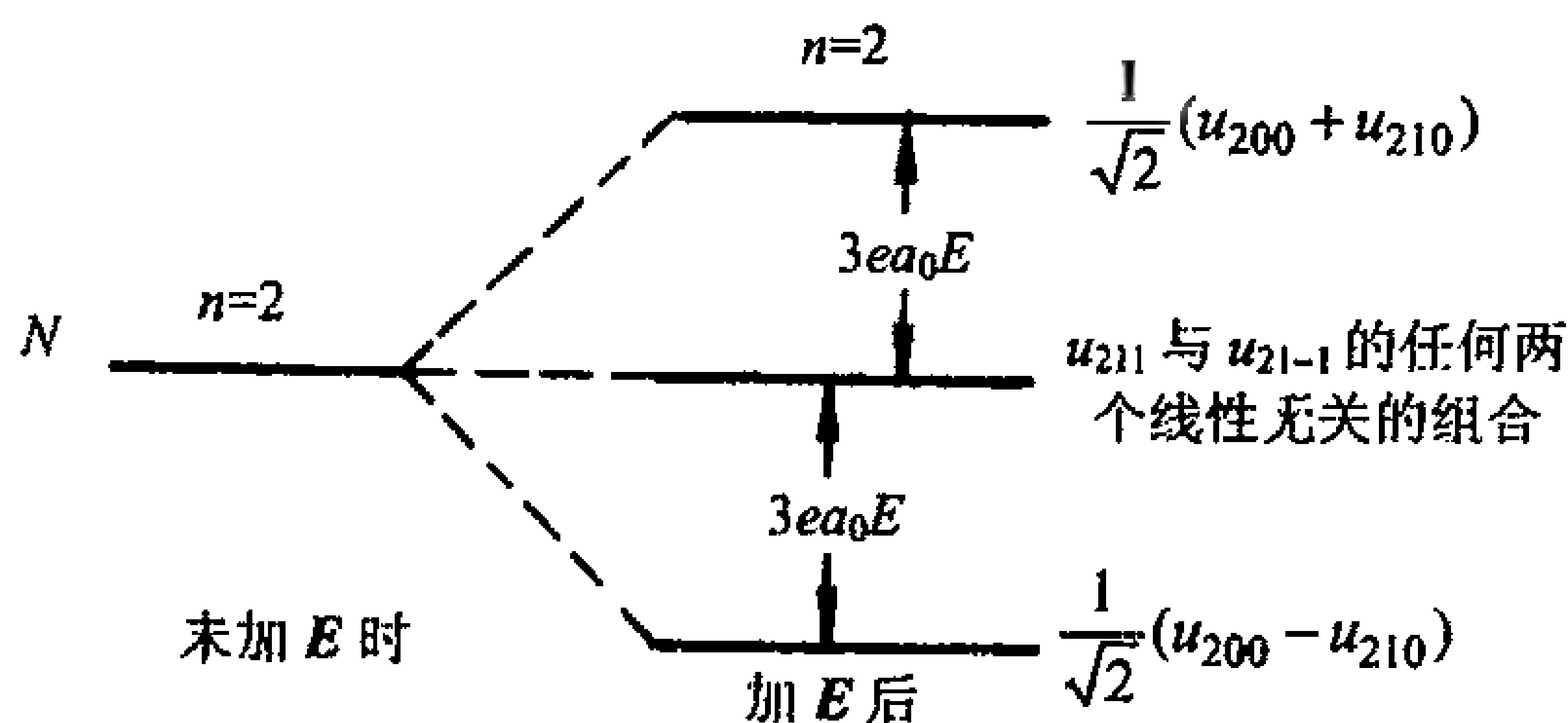
$$w_1^{(4)} = -3eEa_0$$

(1) 对于能级的一级修正表达式为

$$\Delta E = w_1 = \begin{cases} 3eEa_0 \\ 0 \\ 0 \\ -3eEa_0 \end{cases}$$

(2) 此时还存在简并，对应于 $w_1^{(2)} = 0, w_1^{(3)} = 0$.

(3) 能级图如题图 6.43 所示.



题图 6.43

由电偶极跃迁选择规则，$\Delta l = \pm 1, \Delta m = 0, \pm 1$．由此知可观察到两条谱线：$h\nu_1 = 3ea_0E$，$\nu_1 = \dfrac{3ea_0E}{h}$；$h\nu_2 = 2\times 3ea_0E$，$\nu_2 = \dfrac{6ea_0E}{h}$.

6.44　类氢原子在均匀电场、磁场中 $n=2$ 的能级的分裂

题 6.44　考虑类氢原子的 $n=2$ 能级. 假设轨道粒子和核的自旋为 0. 略去所有的相对论效应. (1) 计算存在均匀磁场时能级分裂的最低阶. (2) 存在均匀电场时做类似的计算. (3) 当电场、磁场同时存在并相互垂直时，做同样的计算(任何径向波函数都不需计算；对于其余的计算，它可用参数代替. 对任何角向波函数积分，一旦能够确定它不为 0，则也可用参数代替).

解　(1) 取磁场方向沿 z 方向. 则

$$H = \frac{1}{2m_e}p^2 + V(r) + \frac{eB}{2m_e c}l_z$$

此时 (H, l^2, l_z) 仍是一组守恒量，本征函数可取为

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$$n=1,2,3,\cdots,\ l=0,1,2,\cdots,n-1$$

$$m=-l,-l+1,\cdots l-1,l$$

相应于 $n=2$ 的能级的能量为

$$E_{2lm}=E_{2l}+\frac{eB}{2m_e c}m\hbar$$

$$=\begin{cases}E_{20}, & l=0\\ E_{21}+\begin{cases}\dfrac{eB}{2m_e c}\hbar,\\ 0,\\ \dfrac{-eB}{2m_e c}\hbar,\end{cases} & l=1\begin{cases}m=1\\ m=0\\ m=-1\end{cases}\end{cases}$$

(2) 不考虑自旋时，$n=2$ 的能级是四重简并的，对应的能量都是

$$E_2=-\frac{Z^2e^2}{2a_0}\cdot\frac{1}{2^2}$$

对应的状态为

$$\psi_{200},\psi_{210},\psi_{211},\psi_{21-1}$$

设电场沿 z 方向，则 $H'=e\varepsilon z=E_0V'$，式中 $E_0=e\varepsilon a_0$，$V'=z/a_0=r\cos\theta/a_0$. 由

$$Y_{lm}\cos\theta=\sqrt{\frac{(l+1)^2-m^2}{(2l+1)(2l+3)}}Y_{l+1,m}+\sqrt{\frac{l^2-m^2}{(2l+1)(2l-1)}}Y_{l-1,m}$$

知道，只有当 $\Delta l=\pm1,\Delta m=0$ 时，$H'_{nl'm',nlm}\neq0$

$$(H')_{200,210}=\int\psi_{200}^*H'\psi_{210}d^3x=\int\psi_{200}H'\psi_{210}d^3x$$

$$(H')_{210,200}=\int\psi_{210}^*H'\psi_{200}d^3x=\int\psi_{210}H'\psi_{200}d^3x$$

令 $E'=(H')_{200,210}=(H')_{210,200}$，由 $\det\left|H_{\mu\nu}-E^{(1)}\delta_{\mu\nu}\right|=0$ 得

$$E^{(1)}=\pm E',0,0$$

此时 $n=2$ 的能级分裂为三条：$E_2\pm E',E_2$ (二重简并).

从物理效应上看，由于 Z 的增加，电子被束缚在核附近的概率增大. 所以，外加电场引起的能级分裂变小 $(H'\approx e\varepsilon r\cos\theta)$，$\bar{\gamma}$ 变小. 若仅存在电场，则 $\bar{\gamma}\propto\dfrac{1}{Z},\Delta E\propto\dfrac{1}{Z}$.

(3) 令磁场沿 z 轴方向，电场沿 x 轴方向，则微扰 Hamilton 量为

$$H'=\frac{eB}{2m_e c}l_z+e\varepsilon x=\frac{\beta l_z}{\hbar}+\frac{\sqrt{2}\gamma x}{3a}$$

式中，$\beta=eB\hbar/2m_e c,\gamma=3e\varepsilon a/\sqrt{2},a=a_0/Z$.

x 的非零矩阵元为

$$(x)_{l,m-1}^{l-1,m}=(x)_{l-1,m}^{l,m-1}=\frac{3}{4}\sqrt{\frac{(n^2-l^2)(l-m+1)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}}a$$

$$(x)_{l-1,m-1}^{l,m} = (x)_{l,m}^{l-1,m-1} = -\frac{3}{4}\sqrt{\frac{(n^2-l^2)(l+m-1)(1+m)}{(2l+1)(2l-1)}}a$$

所以

$$x_{00}^{11} = -\frac{3}{\sqrt{2}}a = x_{11}^{00}$$

$$x_{1-1}^{00} = \frac{3}{\sqrt{2}}a = x_{00}^{1-1}$$

此时微扰矩阵为

$$\begin{matrix} l=1, & m=1 \\ l=1, & m=0 \\ l=1, & m=-1 \\ l=0, & m=0 \end{matrix}\begin{pmatrix} \beta & 0 & 0 & -\gamma \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\beta & \gamma \\ -\gamma & 0 & \gamma & 0 \end{pmatrix}$$

能量本征值方程为

$$\det\begin{vmatrix} \beta - E^{(1)} & 0 & -\gamma \\ 0 & -\beta - E^{(1)} & \gamma \\ -\gamma & \gamma & -E^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

其解为

$$E_1^{(1)} = 0, \qquad E_{2/3}^{(1)} = \pm\sqrt{\beta^2 + 2\gamma^2}$$

最后求得 $n=2$ 的能级分裂为三条，能量分别为

$$E_1, \qquad E_2 \pm \sqrt{\beta^2 + 2\gamma^2}$$

6.45　氢原子处于相互垂直的电、磁场中，求决定能移的方程

题 6.45　一个无自旋电子的非相对论氢原子处于一个沿 z 轴的电场 ε 和沿 x 轴的磁场 H 中. 这两个场在能级上的效应是可比较的. (1) 若氢原子处于主量子数 n 等于 2 的态，说出一阶微扰论计算能移的矩阵元哪些为 0. (2) 求一个决定能移的方程. 当你得到行列式方程时，不必进行代数计算. 不要代入径向波函数的明显形式. 将你的结果用 γ^n 在径向波函数之间的矩阵元来表示(n 为某个合适的幂).

$$(l_x \pm \mathrm{i}l_y)|l,m\rangle = \sqrt{(l\mp m)(l\pm m+1)}|l,m\pm 1\rangle$$

解　(1) 这时微扰 Hamilton 量为

$$H' = \frac{eB}{2mc}l_x + e\varepsilon z$$

对 $n=2$，取基 $|200\rangle, |210\rangle, |211\rangle, |21-1\rangle$. 注意由 $(l_x \pm \mathrm{i}l_y)|l,m\rangle$ 的表达式可得

$$l_x|00\rangle = 0, l_x|11\rangle = l_x|1-1\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar|1,0\rangle$$

$$l_x|10\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar\left(|11\rangle + |1-1\rangle\right)$$

同时还注意 $z = r\cos\theta$

$$\langle 210 | r\cos\theta | 200\rangle = \langle 200 | r\cos\theta | 210\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}\langle r\rangle$$

式中，$\langle r\rangle = \int_0^\infty r^3 R_{20}R_{21}\mathrm{d}r$．$z$ 的其余矩阵元为 0.

于是

$$H' = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\frac{1}{3}}e\varepsilon\langle r\rangle & 0 & 0 \\ \sqrt{\frac{1}{3}}e\varepsilon\langle r\rangle & 0 & \frac{\sqrt{2}eB\hbar}{4mc} & \frac{\sqrt{2}eB\hbar}{4mc} \\ 0 & \frac{\sqrt{2}eB\hbar}{4mc} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{2}eB\hbar}{4mc} & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

(2) 由 $|H - \lambda I| = 0$，令 $\alpha = \sqrt{\frac{1}{3}}e\varepsilon\langle r\rangle$，$\beta = \frac{\sqrt{2}eB\hbar}{4mc}$ 则

$$\begin{vmatrix} -\lambda & \alpha & 0 & 0 \\ \alpha & -\lambda & \beta & \beta \\ 0 & \beta & -\lambda & 0 \\ 0 & \beta & 0 & -\lambda \end{vmatrix} = 0$$

得 $\lambda = 0$ 两重根，$\lambda = \pm\sqrt{2\beta^2 + \alpha^2}$．

6.46 用微扰论证明单电子原子在磁场中的能量改变

题 6.46 用一阶微扰论证明．对一个问题 5.10 中的原子(单电子原子 $l = 1$)，在磁场 B 中能量的变动为 $2\varepsilon, \frac{2}{3}\varepsilon, -\frac{2}{3}\varepsilon, -2\varepsilon$．对应于 $j = \frac{3}{2}$ 态，$\frac{1}{3}\varepsilon, -\frac{1}{3}\varepsilon$ 对应于 $j = \frac{1}{2}$ 态，这里 $\varepsilon = \mu_B B \ll W$．

解

$$H = H^{(0)} + H^{(1)}$$

$$H^{(0)} = \frac{1}{2m}P^2 + V(r) + \left(\frac{2W}{\hbar^2}\right)\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$$

$$H^{(1)} = \frac{\varepsilon}{\hbar}(L_z + 2S_z)$$

$H^{(0)}$ 相应于 $j = \frac{3}{2}$ 的一组简并本征态为

$$\Phi_{\frac{3}{2},\frac{3}{2}} = \phi_1\alpha;\quad \Phi_{\frac{3}{2},\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{2}{3}}\phi_0\alpha + \sqrt{\frac{1}{3}}\phi_1\beta;\quad \Phi_{\frac{3}{2},-\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{1}{3}}\phi_{-1}\alpha + \sqrt{\frac{2}{3}}\phi_0\beta;\quad \Phi_{\frac{3}{2},-\frac{3}{2}} = \phi_{-1}\beta$$

用简并微扰理论，将 4 个 Φ 重组成 4 个 V_g 波函数使得 $H^{(1)}V_g$ 正交于 $V_{g'}(g \neq g')$，则

$$E_g^{(1)} = \langle g|H^{(1)}|g\rangle$$

我们首先计算 $H^{(1)}\Phi_{j,m_j}$ 利用下列结果

$$L_z\phi_m = m\hbar\phi_m; \qquad S_z\alpha = \frac{1}{2}\hbar\alpha; \qquad S_z\beta = -\frac{1}{2}\hbar\beta$$

这样

$$H^{(1)}\Phi_{\frac{3}{2},\frac{3}{2}} = (\phi_1\alpha + \phi_1\alpha)\varepsilon = (2\phi,\alpha)\varepsilon \tag{1}$$

$$H^{(1)}\Phi_{\frac{3}{2},\frac{1}{2}} = \left(\sqrt{\frac{1}{3}}\phi_1\beta + \sqrt{\frac{2}{3}}\phi_0\alpha - \sqrt{\frac{1}{3}}\phi_1\beta\right)\varepsilon = \sqrt{\frac{3}{2}}\phi_0\alpha\varepsilon \tag{2}$$

$$H^{(1)}\Phi_{\frac{3}{2},-\frac{1}{2}} = -\left(\sqrt{\frac{2}{3}}\phi_0\beta\right)\varepsilon \tag{3}$$

$$H^{(1)}\Phi_{\frac{3}{2},-\frac{3}{2}} = -(2\phi_{-1}\beta)\varepsilon \tag{4}$$

4 个 Φ 本身满足要求的条件，即它们就是 4 个 V_g，我们可以不通过计算 $H^{(1)}\Phi_{jm_j}$，就可以推出这一点，因为 $L_z + 2S_z$ 与 J_z 对易，所以 $H^{(1)}$ 作用到 Φ_{jm_j} 上给出同样 m_j 的 J_z 的本征函数. 它当然正交于不同 m_j 的本征函数. 由式(1)~式(4)可得一阶能量修正为

$$m_j = \frac{3}{2}, \quad E^{(1)} = \langle\phi_1\alpha | H^{(1)} | \phi_1\alpha\rangle = 2\varepsilon\langle\phi_1\alpha | \phi_1\alpha\rangle = 2\varepsilon$$

$$m_j = \frac{1}{2}, \quad E^{(1)} = \varepsilon\left\langle\sqrt{\frac{2}{3}}\phi_0\alpha + \sqrt{\frac{1}{3}}\phi_1\beta \,\middle|\, \sqrt{\frac{2}{3}}\phi_0\alpha\right\rangle = \frac{2}{3}\varepsilon$$

$$m_j = -\frac{1}{2}, \quad E^{(1)} = -\varepsilon\left\langle\sqrt{\frac{1}{3}}\phi_{-1}\alpha + \sqrt{\frac{2}{3}}\phi_0\beta \,\middle|\, \sqrt{\frac{2}{3}}\phi_0\beta\right\rangle = -\frac{2}{3}\varepsilon$$

$$m_j = -\frac{3}{2}, \quad E^{(1)} = -2\varepsilon\langle\phi_{-1}\beta | \phi_{-1}\beta\rangle = -2\varepsilon$$

同样：对于 $j = \frac{1}{2}$ 态有

$$\Phi_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{1}{3}}\phi_0\alpha - \sqrt{\frac{2}{3}}\phi_1\beta$$

$$\Phi_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{2}{3}}\phi_{-1}\alpha - \sqrt{\frac{1}{3}}\phi_0\beta$$

然后

$$H^{(1)}\Phi_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} = \left(\sqrt{\frac{1}{3}}\phi_0\alpha\right)\varepsilon$$

$$H^{(1)}\Phi_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} = -\left(\sqrt{\frac{1}{3}}\phi_0\beta\right)\varepsilon$$

导至

$$m_j = \frac{1}{2}, \quad E^{(1)} = \frac{1}{3}\varepsilon$$

$$m_j = -\frac{1}{2}, \quad E^{(1)} = -\frac{1}{3}\varepsilon$$

6.47　$n=2$ 的氢原子在静电场 ε 中能级的分裂及讨论

题 6.47　若自旋效应被忽略，主量子数 $n=2$ 的氢原子的 4 个态具有同样能量，证明当静电场 ε 加到处于这些态的氢原子上时，结果导至一阶能量为 $E^0 \pm 3a_0 e\varepsilon, E^0, E^0$.

解　对电量为 $-e$ 的电子在沿 z 轴的电场 ε 中的 Hamilton 量 $H^{(1)} = e\varepsilon z$. 所以，处于 u_{nlm} 态的氢原子的一阶能量变化为

$$E^{(1)} = e\varepsilon\int u_{nlm}^* z u_{nlm} \mathrm{d}\tau = 0$$

原因是，态 u_{nlm} 具有确定的 $(-1)^l$ 宇称，而 z 具有奇宇称. 所以上式的被积函数具有奇宇称. 而奇宇称函数的全空间积分一定为 0，只有混合宇称的函数(即不同宇称函数的线性叠加)全空间积分才不为 0.

将 $u_{211}, u_{21-1}, u_{210}, u_{200}$ 用数字表示为 1～4 态，我们首先计算 $H_{ij}^{(1)}$(基于这 4 个态的矩阵元). 因为这 4 个 u 函数有确定的宇称，所以对角元 $H_{ij}^{(1)} = 0$，而且 z 与 L_z 可对易，所以 u_{nlm} 和 zu_{nlm} 都是 L_z 的本征态. 具有相同的本征值 $m\hbar$. 由于不同本征值 m 的 u 是正交的，所以不为 0 的非对角元只有那些具有相同的 m 量子数，即 u_{210} 和 u_{200}. 为了计算这矩阵元，令 $z = r\cos\theta$. 于是我们有

$$H_{34}^{(1)} = H_{43}^{(1)} = e\varepsilon\int u_{210}^* z u_{200} \mathrm{d}\tau$$

$$= e\varepsilon\left(\frac{1}{2a_0}\right)^4 \int_0^\pi \cos^2\theta\sin\theta \mathrm{d}\theta x\int_0^\infty r^4\left(z - \frac{r}{a_0}\right)\exp(-\frac{r}{a_0})\mathrm{d}r$$

$$= -3e\varepsilon a_0$$

在计算 r 的积分时，我们用到结果

$$\int_0^\infty r^n \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)\mathrm{d}r = n!a_0^{n+1}$$

$H^{(1)}$ 矩阵为

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -A \\ 0 & 0 & -A & 0 \end{pmatrix} \tag{1}$$

式中

$$A = 3e\varepsilon a_0$$

因为未经微扰的四个态是简并的. 所以我们用简并微扰理论. $H^{(1)}$ 的本征值即一阶能量修正. 它的本征矢是 4 个 u 函数的线性组合. 给出了未经微扰的本征波函数. 从式(1)的形

式易看出，有两个本征值为 0，相应的本征态为u_{211}和u_{21-1}我们需要考虑的矩阵部分相关于u_{210}和u_{200}，即

$$\begin{pmatrix} 0 & -A \\ -A & 0 \end{pmatrix}$$

易证明，本征值$\lambda = A$，相应本征矢为

$$\frac{u_{210} - u_{200}}{\sqrt{2}}$$

和$\lambda = -A$，本征矢为

$$\frac{u_{210} + u_{200}}{\sqrt{2}}$$

因为u_{210}负宇称，u_{200}正宇称，所以上面两个本征矢都具有混合宇称. 这样一阶能量为E^0，E^0，$E^0 + 3e\varepsilon a_0, E^0 - 3e\varepsilon a_0$.

讨论　(1) 本题描述的 Stark 效应，从上面原因可看到，只有存在不同l值的简并态存在，才有一阶效应. 氢原子的这种简并发生于电子受到的核的电势具有简单的l/r依赖关系. 然而在碱金属原子中，内层电子的存在使得那些具有较低的l值的价电子受到的静电势能从$1/r$的简单形式发生变化，因为这些价电子穿透了内层的电子层，因此一阶 Stark 效应不会对这些态发生.

(2) 在氢原子中$n = 2$的态的一阶 Stark 效应意味着这些态的原子的行为好像它们具有永久电偶极矩，大小为$3ea_0$. 能够在外电场中与电场平行，仅平行，或成直角，一般来说原子和核的基态是不简并的，故不存在永久电偶极矩.

这里我们没有讨论二阶 Stark 效应，一般来说它在所有态都会发生. 它给出正比于ε^2的能量项，这相应于感应电偶极矩.

6.48　假定上题中的u_{210}和u_{200}具有不同的能级$E^0 + \varDelta$，$E^0 - \varDelta$，证明$H^{(0)} + H^{(1)}$相应的矩阵有本征值$E^0 \pm \sqrt{A^2 + \varDelta^2}$

题 6.48　假定上题中的u_{210}和u_{200}不简并，而具有不同的能量$E^0 + \varDelta$和$E^0 - \varDelta$. (1) 证明$H^{(0)} + H^{(1)}$关于这两态的矩阵，具有本征值$E^0 \pm \sqrt{\varDelta^2 + A^2}$，这里$A = 3a_0 e\varepsilon$. (2) 将这些本征值的极限值 (i) $A \gg \varDelta$ 和 (ii) $A \ll \varDelta$ 和微扰理论的结果相比较. (3) 画出$E^0 \pm (A^2 + \varDelta^2)^{1/2}$依赖$\varepsilon$的函数关系，将这些曲线标上尽可能多的关于本征矢的信息. (4) 若态U_{210}和U_{200}的波数差为36m^{-1}，计算使$A = \varDelta$的电场ε的大小.

解　(1) $H^{(0)} + H^{(1)}$关于U_{210}和U_{200}的矩阵为

$$\begin{pmatrix} E^0 + \varDelta & -A \\ -A & E^0 - \varDelta \end{pmatrix}$$

$H^{(0)}$给出对角元. 题 6.47 的结果给出了非对角元. 它们来自$H^{(1)}$，我们可以通过通常的方法得到矩阵的本征值和本征函数. 若$PU_{210} + qU_{200}$是本征值为λ的本征函数，那么

$$\frac{q}{p}=\frac{\lambda-E^0-\varDelta}{-A}=\frac{-A}{\lambda-E^0+\varDelta} \tag{1}$$

这里 $\lambda=E^0\pm\sqrt{\varDelta^2+A^2}$.

(2) (i) 对 $A\gg\varDelta$，我们有

$$(A^2+\varDelta^2)^{1/2}=A\left(1+\frac{\varDelta^2}{A^2}\right)^{1/2}\approx A+\frac{\varDelta^2}{2A}$$

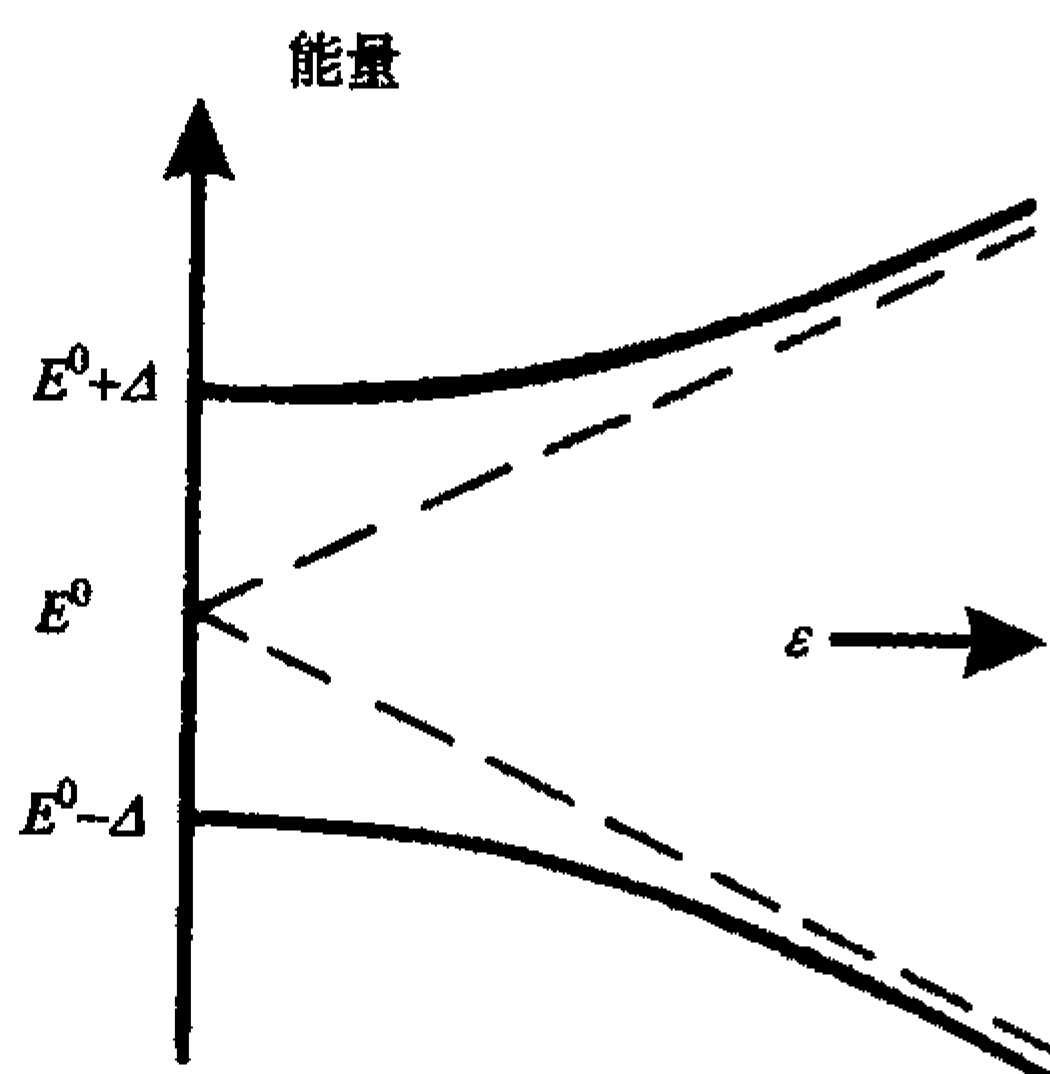
所以能量值近似为 $E^0\pm A\pm(\varDelta^2/2A)$ ，第一个两项与简并微扰理论得出的结果相同. 这一点是合理的，因为对于 $A\gg\varDelta$ 来说，最初的两态能量分离与微扰能量比很小. 小的非零 $\varDelta$ 的效应被 $\varDelta^2/2A$ 显示.

(ii) 对 $A\ll\varDelta$，我们有

$$(A^2+\varDelta^2)^{1/2}=\varDelta\left(1+\frac{A^2}{\varDelta^2}\right)^{1/2}\approx\varDelta+\frac{A^2}{2\varDelta}$$

能量近似为 $E^0\pm\varDelta\pm A^2/2\varDelta$ ，这时，最初两态的能量分离比较微扰能量很大，等效不存在简并，因此也没有线性 Stark 效应、二次项 $\pm A^2/2\varDelta$ 与二阶微扰理论给出的结果一样. 在题 6.15 的 $E^{(2)}$ 的表式中，$\langle j|H^{(1)}|n\rangle=-A$ ，而 E_n-E_j 当最初态是 u_{210} 时是 $2\varDelta$ ，最初态是 u_{200} 时是 $-2\varDelta$.

(3) 题图 6.48(a)画出了能量 $E^0\pm(A^2+\varDelta^2)^{1/2}$ 作为电场 ε 的函数的曲线图. 当 $A\ll\varDelta$ 时，曲线是二次的，而当 $A\gg\varDelta$ 它们趋向简并微扰理论给出的直线，本征函数由式(1)确定，代入 λ 的极限值显示，对于上能量曲线，本征函数趋向 u_{210} . 当 $A/\varDelta$ 趋于 0，而随着 $A/\varDelta$ 趋于无限，本征函数趋于 $(u_{210}-u_{200})/\sqrt{2}$. 对于下能量曲线，相应的极限本征函数为 u_{200} 和 $(u_{210}+u_{200})/\sqrt{2}$.



题图 6.48(a)

(4) 波数分裂 $\tilde{\gamma}$ 相应于能量分离

$$2\varDelta=\cosh\tilde{\gamma}$$

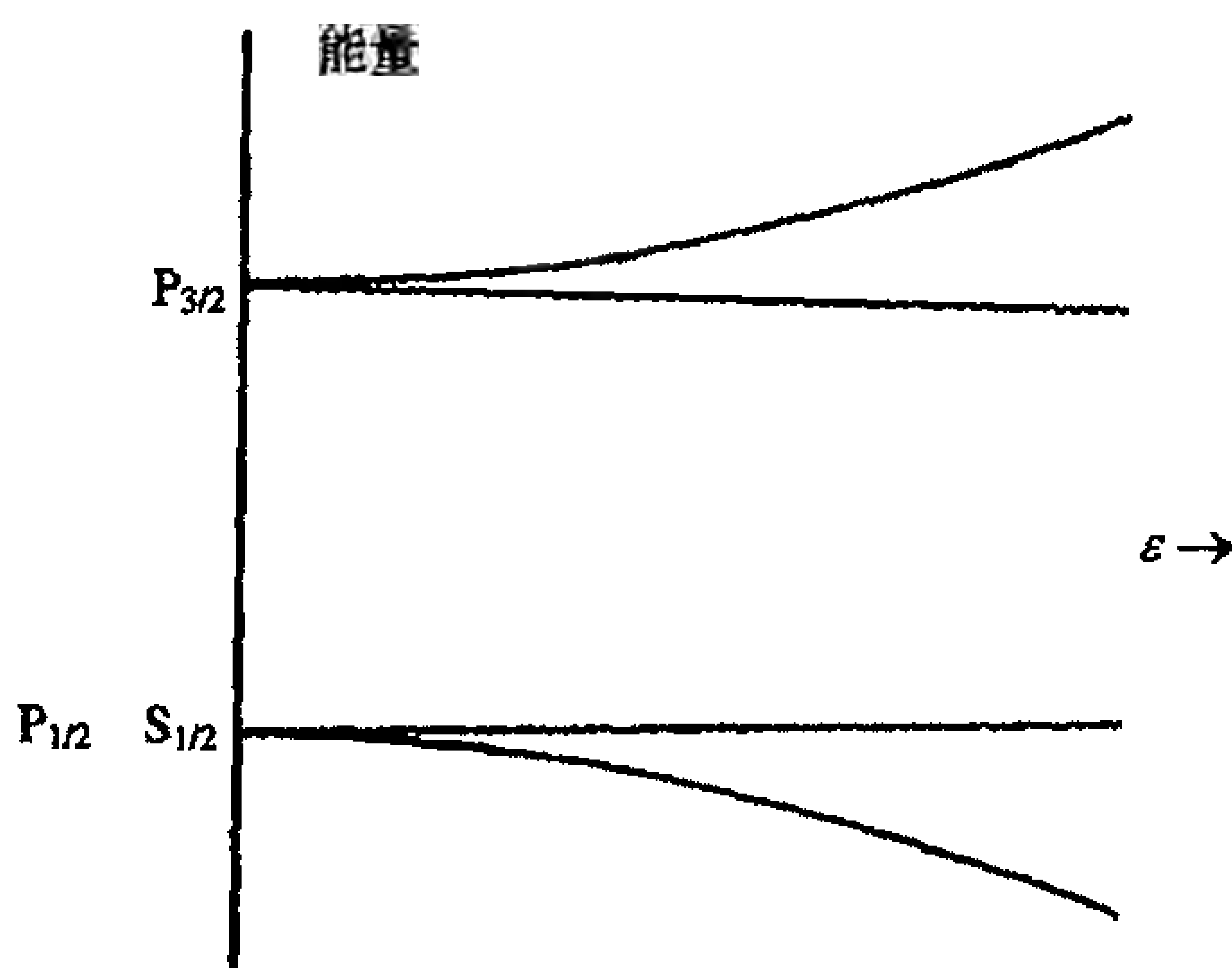
对

$$A = 3a_0 e\varepsilon = \Delta$$

$$\varepsilon = \frac{\cosh\tilde{\gamma}}{6ea_0} = 1.4\times10^5\,\mathrm{Vm^{-1}}$$

讨论 (1)这个问题阐述了两个或更多个态几乎是简并时，微扰计算的步骤，一阶能量是 $H^{(1)}$ 对应简并态的矩阵的本征值. 矩阵的本征矢是非微扰态的线性组合，用这种方法，随着 $H^{(1)}$ 趋于 0，微扰波函数一定平滑地趋向于非微扰波函数.

(2) 这里关于氢原子中 $n=2$ 的态的分裂的计算，由于自旋-轨道效应，是相当不精细的，包含有自旋的 Dirac 电子理论显示对于 $n=2$ 的态有两个能级，但是相应的态并不像本问题中那么简单，4 个 $\mathrm{P}_{3/2}$ 态有较高的能量而两个 $\mathrm{P}_{1/2}$ 态和两个 $\mathrm{S}_{1/2}$ 态有较低的能量. (实际上存在着进一步的精细结构，量子电动力学效应——已知的 Lamb 位移使 $\mathrm{S}_{1/2}$ 态能量比 $\mathrm{P}_{1/2}$ 态提高 $3.5\,\mathrm{m}^{-1}$，核自旋引起 8 个态进一步分裂约 $0.5\,\mathrm{m}^{-1}$，但是这里我们忽略了这些效应). 两个能级差是 $36\,\mathrm{m}^{-1}$ (正如本题叙述的). 本题的方法可以用来计算一阶能量，计算是直接的，虽然有些费力，H^0+H' 关于 8 个态的矩阵要被计算，幸运的是 8×8 矩阵可因式化为 2 个 3×3 矩阵和 2 个 1 元矩阵，能量本征值的结果显示在题图 6.48(b)中，正如图中看到的，对于上面一条非微扰能量不存在线性效应，因为它只有 $l=1$ 的态，而低的能级含有 $l=1$ 和 $l=0$ 态，所以存在线性效应. 图中每一条曲线是双重简并的，相应于一个空间态(它确定能量)被自旋态 α 或 β 相乘.



题图 6.48(b)

6.49 核视为带电球壳时绕铅核转动的 μ^- 介子的基态能量变化

题 6.49 核的有限大小的效应可能会提高基于点核理论所得到的电子能量. (1) 证明若质子被看作一个均匀带电球壳(半径为 b)时，由一阶微扰理论可以得到的电子基态能量相对氢原子基态能量改变了一个因子 $4b^2/3a_0^2$. (2) 为什么能量的变化对一个绕铅核转动的μ^-介子要大得多?

解 (1) 对点核理论来说，核外电子受到的 Coulomb 势为

$$V^{(0)} = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{r}$$

而当核为一均匀带电球壳时，电子的 Coulomb 势为

$$V=-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r},\quad r>b,\qquad V=-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{b},\quad r<b$$

所以微扰势为

$$V^{(1)}=V-V^{(0)}=\begin{cases}\dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left(\dfrac{1}{r}-\dfrac{1}{b}\right), & r<b\\ 0, & r>b\end{cases}$$

由一阶微扰理论可知，基态的一级修正为

$$E^{(1)}=\int u_{1s}^{*}V^{(1)}u_{1s}\mathrm{d}V$$

式中

$$u_{1s}=\left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)^{1/2}\exp(-r/a_0)$$

这样，

$$E^{(1)}=\frac{4}{a_0^3}\cdot\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\int_0^b r^2\left(\frac{1}{r}-\frac{1}{b}\right)\exp\left(\frac{-2r}{a_0}\right)\mathrm{d}r \tag{1}$$

因为$b/a_0\approx10^{-5}$，所以在积分区间指数可视为 1，积分变为

$$\int_0^b\left(r-\frac{r^2}{b}\right)\mathrm{d}r=\frac{1}{6}b^2 \tag{2}$$

因为点核理论的基态能量是

$$E^{(0)}=-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{2a_0} \tag{3}$$

由式(1)、式(2)和式(3)可知

$$\frac{E^{(1)}}{E^{(0)}}=-\frac{4b^2}{3a_0^2} \tag{4}$$

由于b值约为$10^{-15}\,\text{m}$；Bohr 半径$a_0=0.53\times10^{-10}\,\text{m}$. 所以$E^{(1)}/E^{(0)}\sim5\times10^{-10}$，在这种情况下能量的修正是可以忽略的.

(2) 由 Bohr 理论可知质量为m绕电荷为Ze的核转动的电子，其轨道半径正比于$\dfrac{1}{2m}$. Schrödinger 方程也给出同样的结果，所以在μ^-原子中，Bohr 半径a_0将被a替代，这里

$$a=\frac{a_0m_e}{Zm_\mu}$$

式中，m_e，m_μ分别是电子与μ介子的质量，铅核Z等于 82，m_μ=207m_e，所以$a=a_0/82\times207$. 核半径的大小约为$A^{1/3}$，A为核的质量数，对铅是 208，这样铅核的b约为氢的 6 倍. 将这些因子代入式(4)，发现对绕铅核转动的μ介子而言$E^{(1)}/E^{(0)}$的数量级约为 1. 因为微扰理论只有在$E^{(1)}/E^{(0)}\ll1$时，才是有效的；所以以上的数值计算是不成立的，它仅仅指出$E^{(1)}$与$E^{(0)}$是同数量级的，实验也证实了这一点，相应于绕铅核的μ介子的K_α跃迁的能量被测量为 6MeV，而点核理论的能量值为 16MeV.

6.50　以 $e^{-\beta r}$ 为尝试波函数，用变分法求氢原子基态能级上限

题 6.50　(1) 取尝试波函数正比于 $e^{-\beta r}$，这里 β 为变分参数，用变分法计算氢原子基态的上限，用原子常数表示；(2) 对结果进行讨论.

解　设尝试函数为

$$\psi = Ae^{-\beta r}$$

这里 A 为归一化常数，因此有

$$\int |\psi|^2 \mathrm{d}V = 4\pi A^2 \int_0^\infty e^{-2\beta r} r^2 \mathrm{d}r = \frac{8\pi A^2}{(2\beta)^3} = 1 \tag{1}$$

由式(1)可算出

$$A^2 = \frac{\beta^2}{\pi} \tag{2}$$

氢原子的 Hamilton 量是

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{r}$$

对波函数 ψ 来说，能量平均值由下式计算

$$\langle E\rangle = 4\pi A^2 \int_0^\infty e^{-\beta r}\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}\right)e^{-\beta r} r^2 \mathrm{d}r \tag{3}$$

由于 $e^{-\beta r}$ 只与 r 有关，所以

$$\nabla^2 e^{-\beta r} = \left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)e^{-\beta r} = \left(\beta^2 - \frac{2\beta}{r}\right)e^{-\beta r} \tag{4}$$

将式(2)、式(4)代入式(3)，给出

$$\begin{aligned}\langle E\rangle &= 4\beta^3\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\beta^2\int_0^\infty r^2 e^{-2\beta r}\mathrm{d}r\right.\\ &\quad \left.+\left(\frac{\beta\hbar^2}{m_e} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)\int_0^\infty r e^{-2\beta r}\mathrm{d}r\right]\\ &= -\frac{\hbar^2}{2m_e}\beta^2 + \frac{\hbar^2}{m_e}\beta^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\beta\\ &= \frac{\hbar^2}{2m_e}\beta^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\beta\end{aligned} \tag{5}$$

由变分法可知基态能量的上限正是尝试波函数的能量期望值的以 β 为变分参量的极小值. 故需求极值

$$\frac{\mathrm{d}\langle E\rangle}{\mathrm{d}\beta} = \frac{\hbar^2\beta}{m_e} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} = 0$$

得 $\beta = \dfrac{m_e e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}$ 代入式(5)即得

$$\langle E \rangle_{\min} = -\frac{m_e}{2\hbar^2}\left(\frac{e}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{a_0} \tag{6}$$

这里 $a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0}{e^2}\cdot\frac{\hbar^2}{m_e}$ 是 Bohr 半径.

(2) 事实上，式(6)正是氢原子基态能量的正确值，原因是尝试波函数取的形式与氢原子基态波函数一致. 当 $\beta = \frac{1}{a_0}$ 时 e^{-r/a_0} 正是氢原子的基态波函数.

6.51 处于一维盒中的两个非全同粒子，在相互作用势 $\lambda\delta(x_1 - x_2)$ 的零级波函数及一级能移

题 6.51 两个非全同粒子，每个质量都为 m，被禁闭在长度为 L 的一维不可穿透盒中. 系统三个最低能态的波函数和能量是什么？(即至多有一个粒子从其基态激发出来). 若加一个 $V_{12} = \lambda\delta(x_1 - x_2)$ 形式的相互作用势，计算这三个态的能量到 λ 第一级及它们的波函数到 λ 零级.

解 两个粒子不全同，故可同处于基态

$$E_{11} = \frac{\hbar^2\pi^2}{mL^2}, \qquad \psi_{11} = \frac{2}{L}\sin\frac{\pi x_1}{L}\sin\frac{\pi x_2}{L}$$

一个粒子处在基态，另一个处在第 1 激发态

$$E_{12} = \frac{5\hbar^2\pi^2}{2mL^2}, \qquad \psi_{12} = \frac{2}{L}\sin\frac{\pi x_1}{L}\sin\frac{2\pi x_2}{L}$$

$$E_{21} = \frac{5\hbar^2\pi^2}{2mL^2}, \qquad \psi_{21} = \frac{2}{L}\sin\frac{2\pi x_1}{L}\sin\frac{\pi x_2}{L}$$

当两个粒子均处于单粒子的基态，即系统处于其基态时

$$E^{(1)} = (\psi_{11}, V_{12}\psi_{11}) = \frac{4}{L^2}\lambda\int_0^L \sin^4\frac{\pi x_1}{L}\mathrm{d}x_1 = \frac{3\lambda}{2L}$$

到 λ 零级的波函数为

$$\phi = \psi_{11}$$

当只有一个粒子处在基态时，能级是两重简并的，故用简并微扰

$$\iint \psi_{12}^* V_{12}\psi_{12}\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2 = \iint \psi_{21}^* V_{12}\psi_{21}\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2$$

$$= \frac{4}{L^2}\lambda\int_0^L \sin^2\frac{\pi x_1}{L}\sin^2\frac{2\pi x_1}{L}\mathrm{d}x_1 = \frac{\lambda}{L}$$

$$\iint \psi_{12}^* V_{12}\psi_{21}\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2 = \iint \psi_{21}^* V_{12}\psi_{12}\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2 = \frac{\lambda}{L}$$

因此久期方程

$$\det\begin{vmatrix} \frac{\lambda}{L} - E^{(1)} & \frac{\lambda}{L} \\ \frac{\lambda}{L} & \frac{\lambda}{L} - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

得到

$$E_+^{(1)}=\frac{2\lambda}{L},\qquad E_-^{(1)}=0$$

对应的零级波函数为

$$\phi_\pm=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{12}\pm\psi_{21})$$

6.52　三能级系统在微扰 Hamilton 量λH下的能量最低级修正

题 6.52　考虑由下列 Hamilton 量描述的三能级系统：$H=H_0+\lambda H_1\cdot H_0$ 的本征态为 $|1\rangle,|2\rangle,|3\rangle$，且 $H_0|1\rangle=0$，$H_0|2\rangle=\Delta|2\rangle$，$H_0|3\rangle=\Delta|3\rangle$. (1) 以 $|1\rangle,|2\rangle,|3\rangle$ 为基底写出 H_1 矩阵的最一般的 3×3 矩阵表示(λ 是实数). (2) 当用微扰论计算 H 的能谱时，发现准确到 λ 的最低级近似，H 的本征态为 $|1\rangle$，$|\pm\rangle\equiv\frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle\pm|3\rangle)$，相应的本征值为 $E_1=-\frac{\lambda^2}{\Delta}+O(\lambda^3)$

$$E_+=\Delta+\lambda+\frac{\lambda^2}{\Delta}+O(\lambda^3),\qquad E-=\Delta-\lambda+O(\lambda^3).$$

由(1)尽可能多地确定 H_1 的矩阵元.

解　(1) 因 λ 是实数

$$H'=\begin{pmatrix}a&d&e\\d^*&b&f\\e^*&f^*&c\end{pmatrix},\qquad a,b,c\text{ 为实数}$$

(2) 能量本征值的一级近似就是 Hamilton 量在选定基底中的平均值，所以，通过观察 λ 的系数，可以知道

$$\langle+|H_1|+\rangle=1,\qquad\langle-|H_1|-\rangle=-1$$

由于能级 $|2\rangle$，$|3\rangle$ 是简并的，故应转换到解除简并后的基底

$$|\pm\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle\pm|3\rangle)$$

于是以 $|1\rangle$，$|\pm\rangle$ 为基底，应当有

$$\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1/\sqrt{2}&1/\sqrt{2}\\0&1/\sqrt{2}&-1/\sqrt{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a&d&e\\d^*&b&f\\e^*&f^*&c\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1/\sqrt{2}&1/\sqrt{2}\\0&1/\sqrt{2}&-1/\sqrt{2}\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}a&\frac{d+e}{\sqrt{2}}&\frac{d-e}{\sqrt{2}}\\\frac{d^*+e^*}{\sqrt{2}}&1&0\\\frac{d^*-e^*}{\sqrt{2}}&0&-1\end{pmatrix}$$

由此得

$$\begin{pmatrix} b & f \\ f^* & c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

按照在$|1\rangle$，$|\pm\rangle$为基底的H_1的表示，再用非简并态微扰论的结果，即得

$$E_1 = \lambda a + \frac{\lambda^2 |d+e|^2}{2(0-\Delta)} + \frac{\lambda^2 |d-e|^2}{2(0-\Delta)} + O(\lambda^3)$$

$$E_2 = \Delta + \lambda + \frac{\lambda^2 |d+e|^2}{2\Delta} + O(\lambda^3)$$

$$E_3 = \Delta - \lambda + \frac{\lambda^2 |d-e|^2}{2\Delta} + O(\lambda^3)$$

与题中所给形式比较，得

$$|d+e| = \sqrt{2}, \qquad |d-e| = 0, \qquad a = 0$$

得

$$H_1 = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta} & \frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta} & 0 & 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta} & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

(在以$|1\rangle$，$|2\rangle$，$|3\rangle$为基底的表示中).

6.53 在三维谐振子势中两全同 Fermi 子在$-\lambda\delta^3(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)$势作用下的零级波函数和能量一级修正

题 6.53 两全同的自旋为 1/2 的 Fermi 子束缚在三维的各向同性的谐振子势阱中(具有经典频率ω). 另外，两 Fermi 子间有弱的短程的与自旋无关的相互作用. (1) 给出能量直到$5\hbar\omega$的所有能量本征态的光谱学记号(从阱底部量起). (2) 写出系统适当的近似波函数(即至相互作用的最低级)，用单粒子谐振子波函数表示，这一步是对能量至$4\hbar\omega$的所有态做的. (3) 对特定的粒子间相互作用$V_{12} = -\lambda\delta^3(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)$，求(2)中态的能量，准确到$\lambda$的第一级. 结果中可保留积分式.

解 (1) 三维谐振子$E_n = \left(n+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega$，其中$n = 2n_r + l$；$n_r$与$l$均是不小于 0 的整数.

两粒子系统，由系统的H易知

$$E_N = \left(n_1+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega + \left(n_2+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega \approx (N+3)\hbar\omega$$

于是

$$E_0 = 3\hbar\omega, \qquad (l_1,l_2) = (0,0), \qquad \text{只有}\ {}^1\mathrm{S}_0\text{态;}$$

$$E_1 = 4\hbar\omega, \qquad (l_1,l_2) = (1,0) \quad \text{或}\ (0,1), \qquad (\mathrm{S}_1,\mathrm{S}_2) = (1/2,1/2)$$

所以，有态${}^1\mathrm{P}_1, {}^3\mathrm{P}_{2,1,0}$

$$E_2 = 5\hbar\omega$$

1) $(n_1,n_2)=(2,0)$或$(0,2)$：

i) $(l_1,l_2)=(0,0)$，态为$^1S_0$，$^3S_1$；

ii) $(l_1,l_2)=(2,0)$或$(0,2)$，态为$^1D_2$，$^3D_{3,2,1}$.

2) $(n_1,n_2)=(1,1)$，$(l_1,l_2)=(1,1)$，态为$^1S_0$，$^1D_2$，$^3P_{2,1,0}$.

(2) 记单粒子态的基态为ψ_0，第一激发态为ψ_{1m}，式中$m=0,\pm1$是磁量子数. 自旋单、三态分别记为χ_0和χ_{1M}.

系统的态表示为$|NLL_zSs_z\rangle$，需写的波函数为

$$|00000\rangle = \chi_0\psi_0(1)\psi_0(2), \qquad {}^1S_0\text{态}$$

$$|11m00\rangle = \chi_0\frac{1}{\sqrt{2}}(1+P_{12})\psi_0(1)\psi_{1m}(2), \qquad {}^1P_1\text{态}$$

$$|11m1M\rangle = \chi_{1M}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}(1-P_{12})\psi_0(1)\psi_{1m}(2), \qquad {}^3P_{2,1,0}\text{态}$$

$$m,M=0,\pm1$$

(3) $$\langle {}^1S_0|V_{12}|{}^1S_0\rangle \approx -\lambda\int d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2\delta(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)(\psi_0(\boldsymbol{r}_1)\psi_0(\boldsymbol{r}_2))^2$$

$$= -\lambda\int d\boldsymbol{r}\psi_0^4(\boldsymbol{r}) = -\lambda\left(\frac{\alpha}{\sqrt{2\pi}}\right)^3, \quad \alpha=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

$$E(|{}^1S_0\rangle) = 3\hbar\omega - \lambda\left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar}\right)^{3/2}$$

第一激发态有12个态简并(但注意到V_{12}中无自旋量，显然$\langle {}^1P_1|V_{12}|{}^3P_1\rangle=0$)

$$\langle 11m'1M'|V_{12}|11m1M\rangle = \delta_{MM}\langle 1m'|V_{12}|1m\rangle = 0$$

上式为0是由于$S=1$时，自旋波函数对称，所以空间波函数是反称的，对$-\lambda\delta^3(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)$积分为0. 所以

$$E(|{}^3P_{2,1,0}\rangle) = 4\hbar\omega$$

$$\langle 11m'00|V_{12}|11m00\rangle = -\lambda\int\frac{4}{2}d\boldsymbol{r}\psi_0^2(\boldsymbol{r})\psi_{1m'}^*(\boldsymbol{r})\psi_{1m}(\boldsymbol{r})$$

$$= -2\lambda\int d\boldsymbol{r}|\psi_0(\boldsymbol{r})\psi_{1m}(\boldsymbol{r})|^2\delta_{m'm}$$

$$= -\lambda\left(\frac{\alpha}{\sqrt{2\pi}}\right)^3\delta_{m'm}$$

式中，积分号下$\delta_{m'm}$因子出现是由于$\psi_{1m}(\boldsymbol{r})$的角度部分可分离为$Y_{1m}(\theta,\varphi)$. 因此

$$E(|{}^1P_{1m}\rangle) = 4\hbar\omega - \lambda\left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar}\right)^{3/2}$$

式中，m为L_z的本征值.

6.54 Schwinger 表示下的角动量的本征态与本征值及其在微扰$\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{J}$ 下简并的解除

题 6.54 两维各向同性谐振子 Hamilton 量为 $H=\omega(N_1+N_2+1)$，其中 $N_i=a_i^\dagger a_i,\left[a_i,a_j^\dagger\right]=\delta_{ij},\left[a_i,a_j\right]=0$，(1) 算出 H,J_1,J_2,J_3 之间的对易关系．其中 $J_1=\frac{1}{2}(a_2^\dagger a_1+a_1^\dagger a_2)$，$J_2=\frac{i}{2}(a_2^\dagger a_1-a_1^\dagger a_2)$，$J_3=\frac{1}{2}(a_1^\dagger a_1-a_2^\dagger a_2)$，(2) 证明 $J^2=J_1^2+J_2^2+J_3^2$ 和J_3 组成力学量完全集．写出正交归一化的共同本征矢及相应的本征值．(3) 讨论能级的简并情况及加上一个小微扰 $\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{J}$ 后能级的分裂，这里 $\boldsymbol{V}$ 是三维常矢量．

解 (1) 所给体系是一个具有两个单粒子态的 Bose 子体系．$a_i^\dagger$和a_i 分别为粒子产生算符和粒子湮灭算符．由于只有$\left[a_i,a_i^\dagger\right]$不为零，利用关系式

$$[ab,cd]=a[b,c]d+ac[b,d]+[a,c]bd+c[a,d]b$$

很容易写出

$$\left[a_1^\dagger a_1,a_1^\dagger a_1\right]=\left[a_2^\dagger a_2,a_2^\dagger a_2\right]=\left[a_1^\dagger a_1,a_2^\dagger a_2\right]=0$$

$$\left[a_1^\dagger a_1,a_2^\dagger a_1\right]=-\left[a_2^\dagger a_2,a_2^\dagger a_1\right]=-a_2^\dagger a_1$$

$$\left[a_1^\dagger a_1,a_1^\dagger a_2\right]=-\left[a_2^\dagger a_2,a_1^\dagger a_2\right]=a_1^\dagger a_2$$

$$\left[a_2^\dagger a_1,a_1^\dagger a_2\right]=a_2^\dagger a_2-a_1^\dagger a_1$$

于是

$$[H,J_1]=[H,J_2]=[H,J_3]=0$$

$$[J_1,J_2]=\mathrm{i}J_3,\qquad [J_2,J_3]=\mathrm{i}J_1,\qquad [J_3,J_1]=\mathrm{i}J_2$$

(2) 从(1)中得到的对易关系知，J_1，J_2，J_3 即为角动量算符的三个分量．由 $J^2=J_1^2+J_2^2+J_3^2$，与 J_1,J_2,J_3 的表示式，不难得到 $J^2=\frac{N}{2}\left(\frac{N}{2}+1\right)$，其中 $N=N_1+N_2=a_1^\dagger a_1+a_2^\dagger a_2$．所以，$J^2$和$J_3$ 互相对易，组成二自由度系统的力学量完全集，其归一化的共同本征矢为

$$|n_1n_2\rangle=(n_1!n_2!)^{-1/2}\left(a_1^\dagger\right)^{n_1}\left(a_2^\dagger\right)^{n_2}|00\rangle$$

这个态相应的 J^2 的本征值是

$$\frac{1}{2}(n_1+n_2)\left[\frac{1}{2}(n_1+n_2)+1\right]$$

J_3 的本征值是 $\frac{1}{2}(n_1-n_2)$，进一步可取 $n_1=j+m,n_2=j-m$，则有 $J_3|jm\rangle=m|jm\rangle$，$J^2|jm\rangle=j(j+1)|jm\rangle$．

(3) 具有相同 J 值的能级是简并的，其简并情况与通常角动量的相同，加上微扰$\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{J}$ 后，如果转到 $\boldsymbol{V}$ 方向上看，由于各能级 J_V 值不同，因此简并将解除．

6.55 求二维谐振子在势 $\frac{1}{2}\varepsilon xy(x^2+y^2)$ 下的一阶微扰效应

题 6.55 考虑一个二维谐振子($\hbar,m,\omega$ 均为 1)

$$H=\frac{1}{2}(p_x^2+p_y^2)+\frac{1}{2}(x^2+y^2)$$

(1) 最低三个态的波函数和能量是什么? (2) 考虑一微扰 Hamilton 量

$$V=\frac{1}{2}\varepsilon xy(x^2+y^2),\qquad \varepsilon\ll 1$$

对(1)中的态计算由 V 引起的一阶微扰效应.

解 (1)

$$\psi_{n_1n_2}=N_{n_1n_2}\mathrm{e}^{-(x^2+y^2)/2}H_{n_1}(x)H_{n_2}(y)$$

$$E_{n_1n_2}=n_1+n_2+1=N+1$$

最低三个能量态的波函数及能量为

$$\psi_{00}(x,y)=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\exp\left[-\frac{1}{2}(x^2+y^2)\right],\qquad E_{00}=1$$

$$\psi_{10}(x,y)=\sqrt{\frac{2}{\pi}}x\exp\left[-\frac{1}{2}(x^2+y^2)\right],\qquad E_{10}=2$$

$$\psi_{01}(x,y)=\sqrt{\frac{2}{\pi}}y\exp\left[-\frac{1}{2}(x^2+y^2)\right],\qquad E_{01}=2$$

(2) 对基态，一级能量修正为

$$V_{00}=\langle\psi_{00}|V|\psi_{00}\rangle=0$$

这是因为被积函数为奇函数.

当 $N=1$，二重简并，则

$$V_{11}=V_{22}=0$$

$$V_{12}=V_{21}=\frac{\varepsilon}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\int\frac{2}{\pi}xy\mathrm{e}^{-(x^2+y^2)}xy(x^2+y^2)\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

$$=\frac{\varepsilon}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\int\mathrm{e}^{-(x^2+y^2)}(x^2+y^2)x^2y^2\mathrm{d}x\mathrm{d}y=\frac{3\varepsilon}{4}$$

久期方程为

$$\begin{vmatrix}V_{11}-E^{(1)} & V_{12}\\ V_{21} & V_{22}-E^{(1)}\end{vmatrix}=0$$

得能量修正为

$$E'_{10}=E_{10}\pm V_{12}=2\pm\frac{3\varepsilon}{4}$$

6.56　用微扰论计算 $V=\frac{1}{2}k(x^2+y^2+z^2+\lambda xy)$ 中的能级

题 6.56　一个质量为 m 的非相对论粒子在三维势场 $V=\frac{1}{2}k(x^2+y^2+z^2+\lambda xy)$ 中运动.

(1) 将 λ 视作小参数计算基态能量到二阶微扰论. (2) 将 λ 视作小参数用一阶微扰论计算第一激发态能级.

解　(1) 基态波函数

$$\psi_{000}(x,y,z)=\psi_0(x)\psi_0(y)\psi_0(z)$$

能量为 $\frac{3}{2}\hbar\omega$. 一级修正为

$$E_0^{(1)}=\langle 000|\frac{k\lambda}{2}xy|000\rangle=0$$

二级修正为

$$\langle 0,0,0|\frac{k\lambda}{2}xy|n_1n_2n_3\rangle=\frac{\lambda}{4}\hbar\omega\delta_{1n_1}\delta_{1n_2}\delta_{0n_3}$$

$$E_0^{(2)}=\sum_{n_1n_2}\frac{\left|\langle 000|\frac{k\lambda}{2}xy|n_1n_2n_3\rangle\right|^2}{(-n_1-n_2)\hbar\omega}$$

$$=-\frac{\lambda^2}{32}\hbar\omega$$

所以

$$E_0'=\hbar\omega\left(\frac{1}{2}-\frac{\lambda^2}{32}\hbar\omega\right)$$

(2) 第一激发能级 $E_1=\frac{5}{2}\hbar\omega$ 是三重简并的，三个态为

$$|100\rangle,\ |010\rangle,\ |001\rangle$$

$\frac{\lambda k}{2}xy$ 的矩阵元为

$$\frac{\lambda\hbar\omega}{4}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&0\end{pmatrix}$$

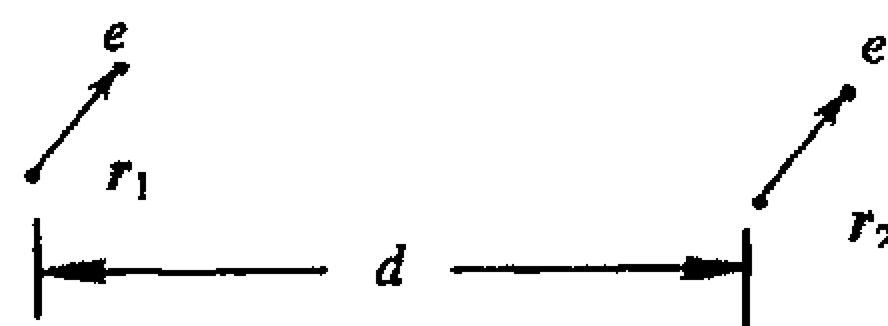
于是一阶能量修正(即上述矩阵本征值)为

$$E_1^{(1)}=0,\qquad \frac{\lambda\hbar\omega}{4},\qquad -\frac{\lambda\hbar\omega}{4}$$

所以第一激发能级分裂成三条

$$\left(\frac{5}{2}+\frac{\lambda}{4}\right)\hbar\omega,\qquad \frac{5}{2}\hbar\omega,\qquad \left(\frac{5}{2}-\frac{\lambda}{4}\right)\hbar\omega$$

6.57　两原子由相互作用势 $V_{12}=\beta\dfrac{x_1x_2e^2}{d^3}$ 作用时的零级波函数和一级能量修正



题图 6.57

题 6.57　考虑两原子间 van de Waals 力的下面模型：每个原子由一个电子通过势 $V(r_i)=\frac{1}{2}m\omega^2r_i^2$ 束缚于一非常重的核所组成. 假定两原子间沿 x 轴分开为 $d\left(d\gg\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\right)$，且存在一相互作用 $V_{12}=\beta\frac{x_1x_2e^2}{d^3}$ (忽略全同粒子不可分辨这一事实，如题图 6.57 所示). (1) 考虑当 $\beta=0$ 时整个系统的基态，给出其能量和含 r_1 和 r_2 式的波函数. (2) 计算由 V_{12} 产生的最低阶非零的能量修正 ΔE，以及波函数修正. (3) 计算两电子沿 x 方向的分离的方均根值，近似到 β 的最低一级.

$$\psi_0(x)=\langle x|0\rangle=\left(\frac{1}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2}\mathrm{e}^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

$$\psi_1(x)=\langle x|1\rangle=\left(\frac{2m\omega}{\sqrt{\pi}\hbar}\right)^{1/2}x\mathrm{e}^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

$$\langle n|x|m\rangle=0,\qquad 对\ |n-m|\neq 1$$

$$\langle n-1|x|n\rangle=\left(\frac{n\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2},\qquad \langle n+1|x|n\rangle=\left(\frac{(n+1)\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2}$$

解　(1) 原子核很重，可认为不动，体系的 Schrödinger 方程为(r_1，r_2 以各自的核为原点)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2+\nabla_2^2)+\frac{1}{2}m\omega^2(r_1^2+r_2^2)+\beta\frac{x_1x_2e^2}{d^3}\right]\psi=E\psi$$

当 $\beta=0$ 时，体系相当于两个独立的三维谐振子，基态的能量和波函数为

$$E_0^{(0)}=3\hbar\omega$$

$$\begin{aligned}\Psi_0^{(0)}(r_1,r_2)&=\psi_0(x_1)\psi_0(y_1)\psi_0(z_1)\psi_0(x_2)\psi_0(y_2)\psi_0(z_2)\\&=\left(\frac{1}{\sqrt{\pi}}\right)^3\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(r_1^2+r_2^2)}\end{aligned}$$

(2)

$$H'=V_{12}=\beta\frac{e^2x_1x_2}{d^3}$$

$$\Psi_1^{(0)}=\psi_1(x_1)\psi_0(y_1)\psi_0(z_1)\psi_1(x_2)\psi_0(y_2)\psi_0(z_2)$$

$$E_1^{(0)}=3\hbar\omega+2\hbar\omega=5\hbar\omega$$

$$H'_{01}=\left\langle\Psi_0^{(0)}\middle|H'\middle|\Psi_1^{(0)}\right\rangle=\frac{\beta e^2}{d^3}\left(\langle 0|x|1\rangle\right)^2=\frac{\beta e^2}{2d^3}\cdot\frac{\hbar}{m\omega}$$

其他矩阵元 $H'_{0m}(m=2,3,\cdots)$ 为零，故 V_{12} 所产生的修正在 β 最低阶的能级和波函数为

$$E_0 = E_0^{(0)} + \langle 0|H'|0\rangle + \frac{|H'_{10}|^2}{E_0 - E_1} = E_0^{(0)} - \frac{1}{2\hbar\omega}\left(\frac{\beta e^2}{d^3}\cdot\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2$$

$$= 3\hbar\omega - \frac{1}{8}\left(\frac{e^2}{d^3}\right)^2 \frac{\hbar}{m^2\omega^3}\beta^2$$

$$\Psi_0 = \Psi_0^{(0)} + \frac{H'_{10}}{E_0 - E_1}\Psi_1^{(0)} = \Psi_0^{(0)} - \frac{\beta e^2}{4d^3}\cdot\frac{1}{m\omega^2}\Psi_1^{(0)}$$

(3) 令 $S_{12} = x_2 - x_1$，则

$$\langle S_{12}\rangle = \langle x_2\rangle - \langle x_1\rangle = 0, \qquad 1\text{ 和 }2\text{ 交换 }\Psi_0\text{ 不变}$$

$$\langle S_{12}^2\rangle = \langle x_1^2 + x_2^2 - 2x_1x_2\rangle = 2\langle x_1^2\rangle - 2\langle x_1x_2\rangle$$

$$\langle x_1x_2\rangle = \left\langle \Psi_0^{(0)} - \lambda\Psi_1^{(0)}\middle| x_1x_2 \middle| \Psi_0^{(0)} - \lambda\Psi_1^{(0)}\right\rangle$$

$$= -\lambda\left[\left\langle \Psi_0^{(0)}\middle| x_1x_2 \middle|\Psi_1^{(0)}\right\rangle + \text{c. c.}\right]$$

$$= -2\lambda\left(\langle 0|x|1\rangle\right)^2 = -\lambda\frac{\hbar}{m\omega}$$

式中

$$\lambda = \frac{\beta e^2}{4d^3}\cdot\frac{1}{m\omega^2}$$

$$\langle x_1^2\rangle = \left\langle \Psi_0^{(0)} - \lambda\Psi_1^{(0)}\middle| x_1^2 \middle| \Psi_0^{(0)} - \lambda\Psi_1^{(0)}\right\rangle$$

$$= \langle 0|x^2|0\rangle + \lambda^2\langle 1|x^2|1\rangle$$

$$= \langle 0|x^2|0\rangle + o(\lambda^2)$$

由 Virial 定理知

$$\frac{1}{2}m\omega^2\langle 0|x^2|0\rangle = \frac{1}{4}\hbar\omega$$

所以

$$2\langle x_1^2\rangle = \frac{\hbar}{m\omega} + o(\lambda^2)$$

于是

$$\langle S_{12}^2\rangle = 2\langle x_1^2\rangle - 2\langle x_1x_2\rangle$$

$$= \frac{\hbar}{m\omega} + \frac{2\hbar}{m\omega}\lambda + o(\lambda^2) \approx \frac{\hbar}{m\omega}(1 + 2\lambda)$$

最后可得两电子在 x 方向的间距的方均根为

$$\sqrt{\left\langle (d + S_{12})^2\right\rangle} = \sqrt{d^2 + 2d\langle S_{12}\rangle + \langle S_{12}\rangle}$$

$$= \sqrt{d^2 + \frac{\hbar}{m\omega}(1 + 2\lambda)}$$

$$\approx d\left(1 + \frac{\hbar}{2m\omega d^2} + \frac{\hbar\lambda}{m\omega d^2}\right)$$

6.58　三维各向同性谐振子在微扰 $H'=bxy$ 下的能级分裂

题 6.58　三维各向同性谐振子(自然角频率为 ω_0，质量为 m)的第一激发态是三重简并的. 用微扰方法计算由于微扰 $H'=bxy$ (b 是常数)引起的这三重简并态的能量分裂至第一级. 用未微扰三维谐振子的波函数表示三分裂能级的第一级波函数. 已知对一维谐振子 $\langle n|x|n+1\rangle=\sqrt{\dfrac{(n+1)\hbar}{2m\omega_0}}$.

解　未微扰的能量本征态可写为

$$|n_x n_y n_z\rangle=|n_x\rangle|n_y\rangle|n_z\rangle$$

式中，$|n\rangle$ 是一维谐振子第 n 个本征态.

记 $|\psi_1\rangle=|100\rangle$, $|\psi_2\rangle=|010\rangle$, $|\psi_3\rangle=|001\rangle$，则

$$H'=\frac{\hbar b}{2m\omega_0}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&0\end{pmatrix}$$

于是解下面久期方程

$$\det\left|H'-E^{(1)}\right|=0$$

得

$$\begin{cases}E_0^{(1)}=0, & E_0=\dfrac{5}{2}\hbar\omega, & |\psi_0\rangle=|\psi_3\rangle=|001\rangle\\ E_\pm^{(1)}=\pm\dfrac{\hbar b}{2m\omega_0}, & E_\pm=\dfrac{5}{2}\hbar\omega\pm\dfrac{\hbar b}{2m\omega_0}, & |\psi_\pm\rangle=\dfrac{1}{\sqrt{2}}(|100\rangle\pm|010\rangle)\end{cases}$$

6.59　微扰 $H'=\mathrm{i}\lambda[A,H_0]$ 作用下，算符的基态平均值

题 6.59　一个量子系统由 Hamilton 量 $H=H_0+H'$ 描述,其中 $H'=\mathrm{i}\lambda[A,H_0]$ 是一个加在非微扰 Hamilton 量 H_0 上的微扰. A 是一个 Hermite 算符，λ 是一个实数. 设 B 是第二个 Hermite 算符，而 $C=\mathrm{i}[B,A]$. (1) 设算符 A,B 和 C 在非微扰(非简并)基态的期望值已给出，分别记为 $\langle A\rangle_0$，$\langle B\rangle_0$,和 $\langle C\rangle_0$. 当微扰加入时，求出 B 在微扰后的基态上的期望值至 λ 的第一级. (2) 将这个结果试用在如下三维问题上

$$H_0=\sum_{i=1}^{3}\left(\frac{P_i^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x_i^2\right),\qquad H'=\lambda x_3$$

计算基态时 $\langle x_i\rangle(i=1,2,3)$ 的期望值至 λ 的最低阶. 并将这个结果与精确的期望值相比较.

解　(1) 设系统非微扰的本征态及对应的能量分别为 $|k\rangle^{(0)}$，$E_k^{(0)}$

$$\text{即 } H_0|k\rangle^{(0)}=E_k^{(0)}|k\rangle^{(0)}$$

先求基态的一级微扰近似解，一般矩阵元为

$$H'_{n0} = {}^{(0)}\langle n|H'|0\rangle^{(0)} = {}^{(0)}\langle n|\mathrm{i}\lambda AH_0 - \mathrm{i}\lambda H_0 A|0\rangle^{(0)}$$
$$= \mathrm{i}\lambda(E_0^{(0)} - E_n^{(0)})\, {}^{(0)}\langle n|A|0\rangle^{(0)}$$

所以，一级微扰近似下的基态为

$$|0\rangle = |0\rangle^{(0)} + \sum_{n\neq 0}^{\infty}\frac{H'_{n_0}}{(E_0^{(0)} - E_n^{(0)})}|n\rangle^{(0)}$$
$$= (1 - \mathrm{i}\lambda\langle A\rangle_0)|0\rangle^{(0)} + \sum_{n=0}^{\infty}\mathrm{i}\lambda\, {}^{(0)}\langle n|A|0\rangle^{(0)}|n\rangle^{(0)}$$

由此可得

$$\langle 0|B|0\rangle = \left[\left(1+\mathrm{i}\lambda\langle A\rangle_0\right){}^{(0)}\langle 0| + (-\mathrm{i}\lambda)\sum_{n=0}^{\infty}\left({}^{(0)}\langle n|A|0\rangle^{(0)}\right)^{*}\,{}^{(0)}\langle n|\right]B$$
$$\cdot\left[\left(1-\mathrm{i}\lambda\langle A\rangle_0\right)|0\rangle^{(0)} + \mathrm{i}\lambda\sum_{m=0}^{\infty}{}^{(0)}\langle m|A|0\rangle^{(0)}|m\rangle^{(0)}\right]$$
$$\approx \langle B\rangle_0 - \lambda\, {}^{(0)}\langle 0|\mathrm{i}AB - \mathrm{i}BA|0\rangle^{(0)} \qquad (\text{取到}\lambda\text{的一阶})$$
$$= \langle B\rangle_0 + \lambda\, {}^{(0)}\langle 0|C|0\rangle^{(0)} = \langle B\rangle_0 + \lambda\langle C\rangle_0$$

式中，用了 $|k\rangle^{(0)}$ 的完备性 $\sum_k |k\rangle^{(0)}\ {}^{(0)}\langle k| = 1$.

(2) 根据已给的条件

$$H_0 = \sum_{i=1}^{3}\left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x_i^2\right), \qquad H' = \lambda x_3$$

可看出相应的 $A = \dfrac{p_3}{m\omega^2\hbar}$，它使 $H' = \mathrm{i}\lambda[A, H_0] = \lambda x_3$.

设 $B = x_1$，相应的 C 为

$$C_1 = \mathrm{i}[B, A] = 0$$
$$\langle x_1\rangle = \langle x_1\rangle_0 + \lambda\langle C_1\rangle_0 = 0$$

同理，设 $B = x_2$，有

$$\langle x_2\rangle = 0$$

对 $B = x_3$

$$C_3 = \mathrm{i}[B, A] = \mathrm{i}\left[x_3,\ \frac{p_3}{m\omega^2\hbar}\right] = -\frac{1}{m\omega^2}$$
$$\langle C_3\rangle_0 = -\frac{1}{m\omega^2}$$
$$\langle x_3\rangle = \langle x^3\rangle_0 + \lambda\langle C_3\rangle_0 = -\frac{\lambda}{m\omega^2}$$

现在考虑 $H = H_0 + H'$ 的精确解

$$H=\sum_{i=1}^{3}\left(\frac{p_i^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x_i^2\right)+\lambda x_3$$
$$=H_{01}(x_1)+H_{02}(x_2)+H_{03}\left(x_3+\frac{\lambda}{m\omega^2}\right)-\frac{\lambda^2}{2m\omega^2}$$

$H_{01}(x_i)=-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x_i^{\ 2}}+\frac{1}{2}m\omega^2x_i^2$ 是一维谐振子，所以加上微扰 λx_3 之后精确的基态波函数为

$$|0\rangle=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{3/4}\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x_1^2\right)\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x_2^2\right)\times\exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}\left(x_3+\frac{\lambda}{m\omega^2}\right)^2\right]$$

则有

$$\langle x_1\rangle=0,\qquad \langle x_2\rangle=0,\qquad \langle x_3\rangle=-\frac{\lambda}{m\omega^2}$$

结果与微扰论所得完全一致.

6.60　三维谐振子在微扰 $\Delta V=kxyz+\frac{k^2}{\hbar\omega}x^2y^2z^2$ 下基态能量修正

题 6.60　一个粒子在三维谐振子势阱中运动

$$V(x,y,z)=\frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2+z^2)$$

一个形式为 $\Delta V=kxyz+\frac{k^2}{\hbar\omega}x^2y^2z^2$ 的弱微扰加在粒子上，其中 k 是一个微小常数(注意同一常数 k 在两项中都出现). (1) 计算基态能级移动到 k 的二级；(2) 用一个与微扰论无关的论据，求系统基态 x 的期望值.

注意　一维谐振子最初几个波函数给出如下：

基态：
$$\psi_0(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$

第一激发态：
$$\psi_1(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\right)x\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$

第二激发态：
$$\psi_2(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{2m\omega}{\hbar}x^2-1\right)\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$

解　(1) 粒子在三维谐振子势阱中的基态为

$$\Phi_0(x,y,z)=\psi_0(x)\psi_0(y)\psi_0(z)$$
$$=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{3/4}\exp\left[-\frac{m\omega^2}{2\hbar}(x^2+y^2+z^2)\right]$$

先考虑一级微扰近似

$$\langle \Delta E\rangle_1 = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\Phi_0(x,y,z)\left(kxyz+\frac{k^2}{\hbar\omega}x^2y^2z^2\right)\Phi_0(x,y,z)$$
$$=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{3/2}\frac{k^2}{\hbar\omega}\left[\int_{-\infty}^{+\infty}x^2\exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right)\mathrm{d}x\right]^3$$
$$=\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^3\frac{k^2}{\hbar\omega}$$

要计算能级移动到 k 的二级，还必须考虑 $\Delta V'=kxyz$ 项的二级微扰修正. 矩阵元为

$$\langle n|\Delta V'|0\rangle = \int \mathrm{d}^3x\Phi_n(x,y,z)(kxyz)\Phi_0(x,y,z)$$
$$=k\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_{n1}(x)x\psi_0(x)\mathrm{d}x\cdot\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_{n2}(y)y\psi_0(y)\mathrm{d}y\cdot\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_{n3}(z)z\psi_0(z)\mathrm{d}z$$
$$=k\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2}\delta(n_1-1)\delta(n_2-1)\delta(n_3-1),\qquad n=n_1+n_2+n_3$$

二级修正为

$$\langle \Delta E\rangle_2 = \sum_{n\neq 0}\frac{|\langle n|\Delta V'|0\rangle|^2}{E_0-E_n}=\frac{k^2\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^3}{E_0-E_3}$$
$$=-\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^3\frac{k^2}{3\hbar\omega}$$

所以计算到 k 的二次的基态能级移动为

$$\Delta E=\langle \Delta E\rangle_1+\langle \Delta E\rangle_2=\frac{2}{3}\frac{k^2}{\hbar\omega}\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^3$$

(2) 因为 $V+\Delta V$ 在 $x\to -x$，$y\to -y$ 下不变，所以 $H(x,y,z)=H(-x,-y,z)$. 而基态波函数又是非简并的，所以

$$\psi(-x,-y,z)=\psi(x,y,z)$$

于是

$$\langle x\rangle=(\psi,x\psi)$$
$$=\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x',y',z')x'\psi(x',y',z')\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z'$$
$$=-\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x,y,z)\cdot x\cdot\psi(x,y,z)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$$
$$=-\langle x\rangle$$

式中，用了变换 $x'=-x$, $y'=-y$, $z'=z$. 所以

$$\langle x\rangle=0$$

同理得到

$$\langle y\rangle=0,\qquad \langle z\rangle=0$$

所以

$$\langle x\rangle=0$$

6.61　自旋1/2的三维谐振子在微扰$\lambda\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}$下的基态能量修正

题6.61　一个自旋$\frac{1}{2}$粒子在球对称势$V=\frac{1}{2}m\omega^2r^2$中运动，并受到微扰$H'=\lambda\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}$. 因此总Hamilton量为$H=H_0+H'$, $H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2r^2$, $H'=\lambda\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}$，求基态能量改变到微扰$H'$的二阶.

解　未受微扰前基态是二重简并的，自旋沿z轴向上或向下.

处理简并能级的受微扰问题时，如果将微扰Hamilton量对角化后仍不能消除简并，就应该将矩阵

$$\langle n|V|n'\rangle+\sum_m\frac{\langle n|V|m\rangle\langle m|V|n'\rangle}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\equiv\langle n|W|n'\rangle$$

对角化以求新的能级位置，这就是二级近似中简并的解除.

以$|n_x,n_y,n_z,\uparrow\rangle$或$|n_x,ny,n_z,\downarrow\rangle$标记各个未受微扰的量子态，$n_x,n_y,n_z$分别是粒子在$x$，$y$，$z$三个方向上的振动量子数，$\uparrow(\downarrow)$表示粒子自旋沿$z$轴向上(向下). 由于$E^{(0)}{}_{n_x,n_y,n_z}=(n_x+n_y+n_z+\frac{3}{2})\hbar\omega$，可写出该$W$矩阵的矩阵元为

$$\begin{aligned}&\langle 000\uparrow|W|000\uparrow\rangle\\&=\frac{\lambda^2\langle 000\uparrow|\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathrm{r}|001\uparrow\rangle\langle 001\uparrow|\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathrm{r}|000\uparrow\rangle}{\frac{3}{2}\hbar\omega-\frac{5}{2}\hbar\omega}+\frac{\lambda^2\langle 000\uparrow|\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathrm{r}|100\downarrow\rangle\langle 100\downarrow|\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathrm{r}|000\uparrow\rangle}{\frac{3}{2}\hbar\omega-\frac{5}{2}\hbar\omega}\\&\quad+\frac{\lambda^2\langle 000\uparrow|\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathrm{r}|010\downarrow\rangle\langle 010\downarrow|\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathrm{r}|000\uparrow\rangle}{\frac{3}{2}\hbar\omega-\frac{5}{2}\hbar\omega}\\&=\lambda^2\left(\frac{|\langle 000\uparrow|\sigma_z z|001\uparrow\rangle|^2}{-\hbar\omega}+\frac{|\langle 000\uparrow|\sigma_x x|100\downarrow\rangle|^2}{-\hbar\omega}+\frac{|\langle 000\uparrow|\sigma_y y|010\downarrow\rangle|^2}{-\hbar\omega}\right)\\&=-\frac{3\lambda^2}{2m\omega^2}\end{aligned}$$

在计算中要用到

$$\langle 000|z|001|\rangle=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

$$\langle 000|x|001\rangle=\langle 000|y|001\rangle=0$$

同样计算可得

$$\langle 000\downarrow|W|000\downarrow\rangle = -\frac{3\lambda^2}{2m\omega^2}$$

$$\langle 000\uparrow|W|000\downarrow\rangle = 0$$

其本征值为$-\dfrac{3\lambda^2}{2m\omega^2}$(二重简并).

这说明，到二级近似，简并仍未消除. 基态仍是二重简并的，能量为

$$\frac{3}{2}\hbar\omega - \frac{3\lambda^2}{2m\omega^2}$$

6.62　球形腔内的粒子在弱磁场，弱电场及极强磁场中基态能量修正

题 6.62　考虑一个被束缚在球形腔内(半径为R_0)的自旋为 0，质量为m、电荷为e的粒子，势阱的能量为

$$V(r) = \begin{cases} 0, & |\boldsymbol{x}| = r \leqslant R_0 \\ \infty, & |\boldsymbol{x}| = r > R_0 \end{cases}$$

(1) 求系统的基态能量；(2) 假设加上一个强度为$|\boldsymbol{B}|$的弱均匀磁场，计算基态能级的移动；(3) 假设加上的是强度为$|\boldsymbol{E}|$的弱均匀电场，基态能量是减少还是增加？只需写下结论(不需推导公式). (4) 如果加上的是强度为$|\boldsymbol{B}|$的极强磁场，基态能量的近似值又是多少？

解　(1) 在上述势阱中运动的粒子的径向方程为

$$R'' = \frac{2}{r}R' + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R = 0, \qquad r < R_0$$

式中，$k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$，而边界条件为$R(r)|_{r=R_0} = 0$.

引进一个无量纲变数$\rho = kr$，上述方程可重写为

$$\frac{\mathrm{d}^2R}{\mathrm{d}\rho^2} + \frac{2}{\rho}\cdot\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}\rho} + \left[1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R = 0$$

上述方程在$\rho \to 0$时有界的解为$j_l(\rho)$. 于是径向波函数为

$$R_{kl}(r) = C_{kl}\,j_l(kr)$$

式中，C_{kl}是归一化常数.

由边界条件得

$$j_l(kR_0) = 0$$

此方程的解是分立的

$$kR_0 = \alpha_{n_r l}, \qquad n_r = 1,2,3,\cdots$$

所以粒子的束缚态能级为

$$E_{n_r l} = \frac{\hbar^2}{2mR_0^2}\alpha_{n_r l}^2, \qquad n_r = 1,2,3,\cdots$$

式中，系统的基态能量为$E_{10} = \dfrac{\hbar^2\pi^2}{2mR_0^2}$.

(2) 假定所加的均匀弱磁场方向沿 z 轴，则矢势可取为

$$A_x = -\frac{B}{2}y, \qquad A_y = \frac{B}{2}x, \qquad A_z = 0$$

系统 Hamilton 量为

$$H = \frac{1}{2m}\left[\left(p_x + \frac{eB}{2c}y\right)^2 + \left(p_y - \frac{eB}{2c}x\right)^2 + p_z^2\right] + V(r)$$

$$= \frac{1}{2m}\left[p^2 - \frac{eB}{c}(xp_y - yp_x) + \frac{e^2B^2}{4c^2}(x^2+y^2)\right] + V(r)$$

$$= \frac{1}{2m}\left[p^2 - \frac{eB}{c}l_z + \frac{e^2B^2}{4c^2}(x^2+y^2)\right] + V(r)$$

B 是弱场，所以 $-\frac{eB}{2mc}l_z + \frac{e^2B^2}{8mc^2}(x^2+y^2)$ 可看作微扰. 而当系统处在基态时，$l = 0,\ l_z = 0$. 只需考虑 $B^2(x^2+y^2)$ 项的效应.

由(1)中结论，基态波函数为

$$\psi(r,\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{2k^2}{R_0}}j_0(kr)\mathrm{Y}_{00}(\theta,\varphi)$$

根据微扰论

$$E^{(1)} = \left\langle \psi(r,\theta,\varphi)\left|\frac{e^2B^2}{8mc^2}(x^2+y^2)\right|\psi(r,\theta,\varphi)\right\rangle$$

$$= \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2}\right)\frac{e^2B^2R_0^2}{12mc^2}$$

其中用到了基态能量条件 $kR_0 = x_{10} = \pi$.

(3) 假设加上的是强度为 $|\boldsymbol{E}|$ 的弱均匀电场，基态能量是减少的.

(4) 假设加在系统上的强度为 $|\boldsymbol{B}|$ 的磁场是一个极强磁场，则此时粒子可看成是一个平面转子或二维谐振子，$\frac{1}{2}m\omega^2 = \frac{1}{2m}\frac{e^2B^2}{4c^2}$. 基态能量近似为

$$E_0 = \hbar\omega = \frac{eB}{2mc}\hbar$$

6.63　三维谐振子在均匀电场，均匀磁场中能级的简并度及能量变化

题 6.63　一质量为 m、带电荷 Q 的粒子在三维各向同性势阱 $V = \frac{1}{2}kr^2$ 中运动. (1) 求能级及其简并度. (2) 加一均匀电场后，新的能级及简并度如何? (3) 如果代之以加一均匀磁场，最低的四个态的能量是多少?

解　(1) 三维势阱

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{1}{2}kr^2 = H_x + H_y + H_z$$

式中

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{1}{2}kx_i^2, \qquad i = x, y, z$$

其能级为

$$E_N = \left(N + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega_0, \qquad \omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$N = n_x + n_y + n_z$$

写成

$$n_y + n_z = N - n_x$$

得简并度为

$$f = \sum_{n_x=0}^{N}(N - n_x + 1) = \frac{1}{2}(N+1)(N+2)$$

(2) 设 z 方向加均匀电场 E

$$\begin{aligned} H &= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kr^2 - QEz \\ &= \left(\frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2\right) + \left(\frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}ky^2\right) + \left[\frac{p_z^2}{2m} + \frac{1}{2}k\left(z - \frac{QE}{k}\right)^2\right] - \frac{Q^2E^2}{2k} \end{aligned}$$

与(1)比较得

$$E_N = \left(N + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega_0 - \frac{1}{2k}Q^2E^2$$

$$f = \frac{1}{2}(N+1)(N+2)$$

(3) 设 z 方向加一均匀磁场 B 在柱坐标下，取矢势

$$A_\varphi = \frac{1}{2}B\rho, \qquad A_r = A_z = 0$$

得

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{Q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + V \\ &= \frac{1}{2m}p^2 - \frac{Q}{mc}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A} + \frac{Q^2}{2mc^2}A^2 + \frac{1}{2}k\rho^2 + \frac{1}{2}kz^2 \qquad (\text{因为}\nabla\cdot A = 0) \\ &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2 + \frac{1}{2}m\omega'^2\rho^2\right) + \left(\frac{p_z^2}{2m} + \frac{1}{2}kz^2\right) - \frac{Q}{|Q|}\omega L_z \\ &= H_i + H_z \mp \omega L_z \end{aligned}$$

式中

$$\nabla_i^2 = \nabla_x^2 + \nabla_y^2, \qquad \omega = \frac{|Q|B}{2Mc}, \qquad \omega'^2 = \omega^2 + \omega_0^2$$

$\mp$ 号对应于 Q 是正值或负值.

于是 H_i 为平面轴对称谐振子 Hamilton 量，H_z 为 z 方向一维谐振子 Hamilton 量. 所以

$$E_{n_\rho n_z m}=(2n_\rho+1+|m|)\hbar\omega'+\left(n_z+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0\mp m\hbar\omega$$
$$=\left(\hbar\omega'+\frac{1}{2}\hbar\omega_0\right)+2n_\rho\hbar\omega'+|m|\hbar\omega'\mp m\hbar\omega+n_x\hbar\omega_0$$

式中

$$n_\rho=0,1,2,\cdots$$
$$n_x=0,1,2,\cdots$$
$$m=0,\pm1,\pm2,\cdots$$

四个最低能级为

$$E_0=\hbar\omega'+\frac{1}{2}\hbar\omega_0$$
$$E_1=\hbar\omega'+\frac{1}{2}\hbar\omega_0+\hbar(\omega'-\omega)=2\hbar\omega'-\hbar\omega+\frac{1}{2}\hbar\omega$$
$$E_2=\hbar\omega'+\frac{1}{2}\hbar\omega_0+\hbar\omega_0=\hbar\omega'+\frac{3}{2}\hbar\omega_0$$
$$E_3=\hbar\omega'+\frac{1}{2}\hbar\omega_0+2\hbar(\omega'-\omega)=3\hbar\omega'-2\hbar\omega+\frac{1}{2}\hbar\omega_0$$

能级顺序的依据是

$$\omega'-\omega=\sqrt{\omega^2+\omega_0^{\ 2}}-\omega<\omega_0<2(\omega'-\omega)$$

6.64　原子在弱磁场及强磁场中的能级分裂

题 6.64　(1) 描述由弱磁场导致的原子能级劈裂. 讨论中须计算 Landeg 因子(假定 L-S 耦合). (2) 描述在强磁场中原子能级劈裂情况(Paschen-Back 效应).

解　考虑 Lande g 因子，系统磁矩为

$$\boldsymbol{\mu}=\mu_0(g_l\boldsymbol{l}+g_s\boldsymbol{S})=\mu_0\left[g_l\boldsymbol{j}+(g_s-g_l)\boldsymbol{S}\right]$$

式中，μ_0 为 Bohr 磁子. 取磁场沿 z 方向，则由磁场 B 导致的 Hamilton 量变化为

$$H_1=-g_l\mu_0Bj_x-(g_s-g_l)\mu_0BS_z$$

(1) 系统的 Hamilton 量为

$$H=H_0+H_1=\frac{p^2}{2m}+V(r)+\xi(r)\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{l}+H_1$$

取 l^2,j^2,j_z 的共同态，则有

$$(H_0-g_l\mu_0j_z)\psi_{nljm_j}=(E_{nlj}-g_l\mu_0Bm_j)\psi_{nljm_j}$$

设 B 很小，则有

$$\bar{s}_z=\frac{\hbar}{2}\langle jm_j|\sigma_z|jm_j\rangle$$

应用公式

$$\langle jm_j|\sigma_z|jm_j\rangle=\begin{cases}\dfrac{m_j}{j}, & j=l+\dfrac{1}{2}\\ -\dfrac{m_j}{j+1}, & j=l-\dfrac{1}{2}\end{cases}$$

于是弱磁场下系统的能级为

$$E_{nljmj}\approx E_{nlj}-g_l\mu_0Bm_j$$
$$-(g_s-g_l)\mu_0B\begin{cases}\dfrac{m_j}{2j}, & j=l+\dfrac{1}{2}\\ -\dfrac{m_j}{2j+2}, & j=l-\dfrac{1}{2}\end{cases}$$

考虑到 $g_l=-1$, $g_s=-2$，上两式可综合为

$$E_{nljmj}\approx E_{nlj}-g\mu_0Bm_j$$

式中，g 即为原子的 Lande g 因子

$$g=-\left[1+\frac{j(j+1)+s(s+1)-l(l+1)}{2j(j+1)}\right]$$

所以，加入弱磁场后，一条能级劈裂成 $(2j+1)$ 条.

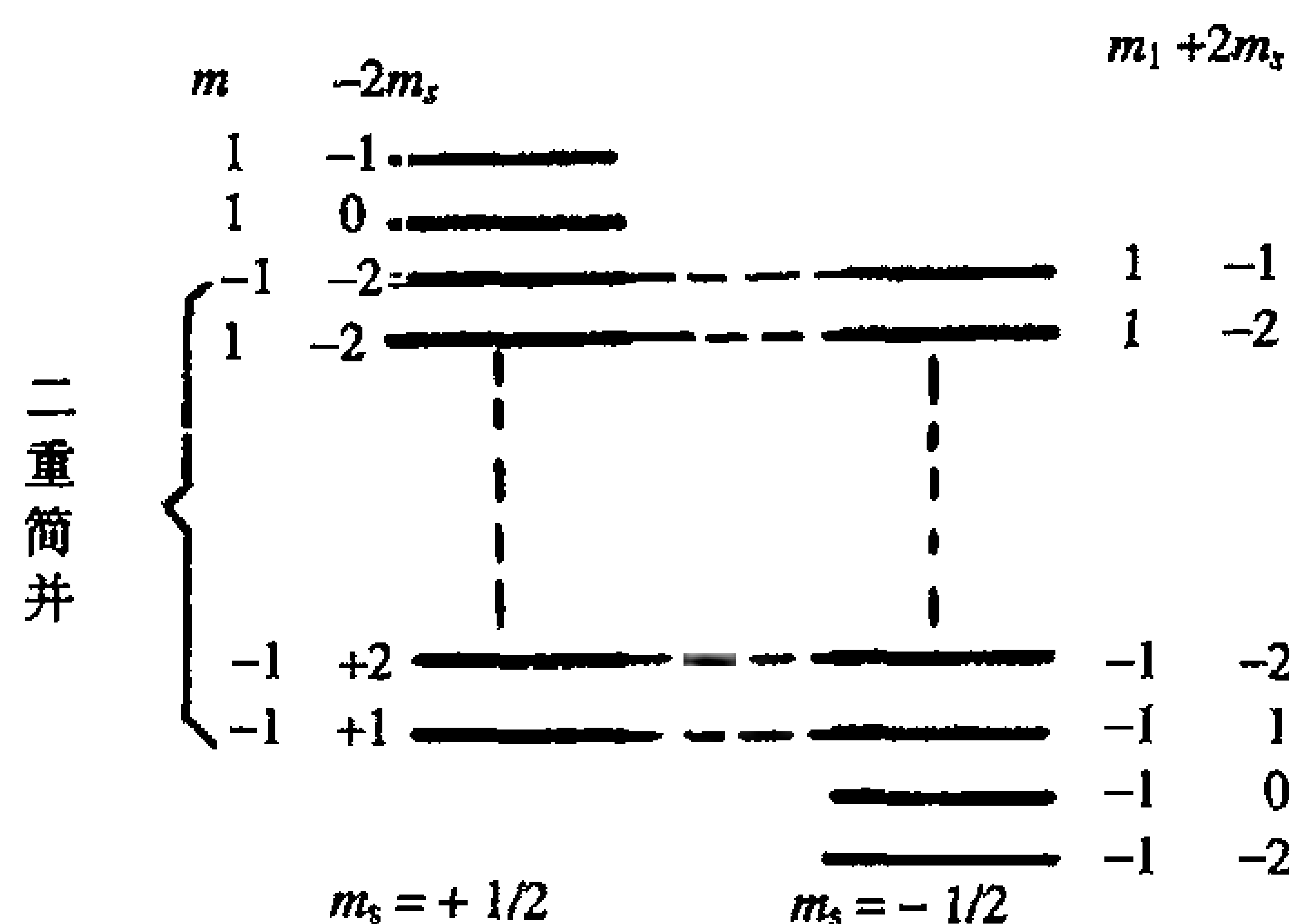
(2) 加入强弱场，$\xi(r)\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{l}$ 项可忽略. 系统的 Hamilton 量为

$$H=\frac{p^2}{2m}+V(r)+H_1=H_0+H_1$$

取 (H_0,l^2,l_z,S^2,S_z) 之共同本征态，有

$$H\psi_{nlm_lm_s}=E_{nlm_lm_s}\psi_{mlm_lm_s}$$
$$E_{nlm_lm_s}=E_{nl}-g_l\mu_0Bm_l-g_s\mu_0Bm_s$$
$$=E_{nl}+\mu_0B(m_l+2m_s)$$
$$g_l=-1,\quad g_s=-2$$

$m_s=\pm1/2$，并考虑到选择定则 $\Delta m_s=0$，跃迁分别在 $m_s=+1/2$ 和 $m_s=-1/2$ 两组能级内部进行，故分裂后的能级情况如题图 6.64 所示. 可见，分裂后有 $2l-1$ 条能级仍是二重简并的，于是能级劈裂成 $2(2l+1)-(2l-1)=2l+3$ (条).



题图 6.64

6.65 单价电子原子在弱、强磁场中的能级分裂

题 6.65 考虑一带有一个单价电子的原子，其精细结构 Hamilton 量由 $\xi \boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$ 给定. (1) 确定 $j=L+\frac{1}{2}$ 和 $j=L-\frac{1}{2}$ 表征的能级差(精细结构间隔). 用 ξ 表示. (2) 将这一原子放入一弱外磁场 H 中，用微扰论确定原子相邻磁(Zeeman)亚能级间的劈裂. (3) 若原子处于一极强磁场中，定性描述上述问题将如何变化.

解 (1)在 (j^2,L^2,j_z) 表象中

$$\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}=\frac{1}{2}(j^2-L^2-S^2)$$
$$=\frac{\hbar^2}{2}\left[j(j+1)-l(l+1)-s(s+1)\right]$$
$$=\frac{\hbar^2}{2}\left[j(j+1)-l(l+1)-\frac{3}{4}\right]$$

$$\Delta E=E_{j}=l+\frac{1}{2}-E_{j}=l-\frac{1}{2}=\overline{\xi(r)}\cdot\frac{\hbar^2}{2}(2l+1)$$

(2) 在弱磁场中

$$H=\frac{p^2}{2m}+V(r)+\frac{eH}{2mc}(L_z+2S_z)+\xi(r)\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}$$
$$H=\frac{p^2}{2m}+V(r)+\frac{eH}{2mc}j_z+\xi(r)\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}\cdot+\frac{eH}{2mc}S_z\equiv H_0+\frac{eH}{2mc}S_z$$

取 (J^2,L^2,j_z) 为共同本征态

$$H_0\psi_{nljm_j}=\left(E_{nlj}+m_j\frac{eH\hbar}{2mc}\right)\psi_{nljm_j}$$

磁场 H 很小，可将 $\frac{eH}{2mc}S_z$ 项作为微扰项. $\psi_{nljm_j}=\psi_{nljm_j}(r,\theta,\varphi)$. 其角向部分波函数

$$\varphi_{ljm_j}=\sqrt{\frac{j+m_j}{2j}}\alpha Y_{j-\frac{1}{2},m_j-\frac{1}{2}}+\sqrt{\frac{j-m_j}{2j}}\beta Y_{j-\frac{1}{2},m_j+\frac{1}{2}}\quad j=l+\frac{1}{2}$$
$$\varphi_{ljm_j}=-\sqrt{\frac{j-m_j+1}{2j+2}}\alpha Y_{j+\frac{1}{2},m_j-\frac{1}{2}}+\sqrt{\frac{j+m_j+1}{2j+2}}\beta Y_{j+\frac{1}{2},m_j+\frac{1}{2}}\quad j=l-\frac{1}{2}$$

式中，α,β 为 S_z 对应于本征值 $\frac{\hbar}{2}$ 和 $-\frac{\hbar}{2}$ 的本征态. 由此得

$$\left\langle jm_j\middle|\sigma_z\middle|jm_j\right\rangle=\begin{cases}\dfrac{m_j}{j}, & j=l+\dfrac{1}{2}\\[2mm] -\dfrac{m_j}{j+1}, & j=l-\dfrac{1}{2}\end{cases}$$

所以

$$\frac{eH}{2mc}\overline{S_z}=\frac{eH\hbar}{4mc}\begin{cases}\dfrac{m_j}{j}, & j=l+\dfrac{1}{2}\\ -\dfrac{m_j}{j+1}, & j=l-\dfrac{1}{2}\end{cases}$$

$$E_{nljm_j}=E_{nlj}+\frac{eH\hbar}{2mc}\begin{cases}\left(1+\dfrac{1}{2j}\right)m_j, & j=l+\dfrac{1}{2}\\ \left(1-\dfrac{1}{2j+2}\right)m_j, & j=l-\dfrac{1}{2}\end{cases}$$

$$\Delta E=\begin{cases}\mu_B H\left(1+\dfrac{1}{2j}\right), & j=l+\dfrac{1}{2}\\ \mu_B H\left(1-\dfrac{1}{2j+2}\right), & j=l-\dfrac{1}{2}\end{cases}$$

(3) 极强磁场情况，$\xi(r)\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}\ll\mu_B B$，所以

$$H=\frac{p^2}{2m}+V(r)+\frac{eH}{2mc}(l_z+2S_z)$$

力学量完备集为(H_0,L^2,L_z,S^2,S_z)所以

$$\begin{aligned}E_{nlmm_s}&=E_{nl}+\frac{eH}{2mc}\hbar(m+2m_s)\\&=E_n+\mu_B H(m\pm1)\end{aligned}$$

$$\Delta E=\mu_B H$$

6.66 电子偶素在$H_0+AS_\mathrm{p}\cdot S_\mathrm{e}-(\boldsymbol{\mu}_\mathrm{p}+\boldsymbol{\mu}_\mathrm{e})\cdot\boldsymbol{B}$作用下的本征函数及能量

题 6.66 电子偶素是由正电子和电子构成的类氢体系. 考虑处在基态的电子偶素$(l=0)$. Hamilton 量H可被写为$H=H_0+H_\mathrm{s}+H_\mathrm{B}$，这里$H_0$是通常的与自旋无关的Coulomb 力部分，$H_\mathrm{s}=AS_\mathrm{p}\cdot S_\mathrm{e}$是正电子与电子自旋相作用的部分，$H_\mathrm{B}=-(\boldsymbol{\mu}_\mathrm{p}+\boldsymbol{\mu}_\mathrm{e})\cdot\boldsymbol{B}$是与外加磁场的作用部分. (1) 在没有外场时，选择怎样的自旋和角动量的本征态最方便? 对于这些态，计算由于H_s引起的能移. (2) 加入极弱的磁场$(H_\mathrm{B}\ll H_\mathrm{s})$. 在这种情况下，体系的能量是什么? (3) 现在假设外加磁场增强，以至于$H_\mathrm{B}\gg H_\mathrm{s}$. 现在什么样的本征函数最合适? 此时由于$H_\mathrm{B}$引起的这些状态的能移是什么? (4) 说明在一般情况下，你如何解出能量和对应的本征函数.

解 (1) 因$\boldsymbol{S}_\mathrm{p}\cdot\boldsymbol{S}_\mathrm{e}=\frac{1}{2}\left(S^2-S_\mathrm{p}^2-S_\mathrm{e}^2\right)$，总自旋

$$\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}_\mathrm{p}+\boldsymbol{S}_\mathrm{e}$$

所以取$|lmss\rangle$作为本征函数最方便.

对态$l=0,\ s=1$

$$H_s|lm1s_z\rangle=\frac{A}{2}\left[1(1+1)-\frac{3}{2}\right]\hbar^2|lm1s_z\rangle,\qquad s_z=0、\pm1$$

相应的能级移动为$\frac{A}{4}\hbar^2$.

对态$l=0$, $s=0$

$$H_s|lm00\rangle=\frac{A}{2}\times\left(-\frac{3}{2}\hbar^2\right)|lm00\rangle$$

相应的能级移动为$-\frac{3}{4}A\hbar^2$.

(2) $H_B\ll H_s$，则外场的作用可看成在(1)中结果上的微扰. 取(1)中的本征函数为基矢. 在讨论以后问题时，无妨设$\boldsymbol{B}=B\boldsymbol{e}_z$，而且为匀强磁场. 于是

$$H_B=-(\boldsymbol{\mu}_p+\boldsymbol{\mu}_e)\cdot\boldsymbol{B}=\frac{eB}{mc}(S_{ze}-S_{zp})$$

$$H_B|0000\rangle=\frac{eB\hbar}{mc}|0010\rangle,\quad H_B|0011\rangle=0$$

$$H_B|0010\rangle=\frac{eB\hbar}{mc}|0000\rangle,\quad H_B|001-1\rangle=0$$

在一级微扰近似下，能级在(1)中按单态、三重态分裂之后，这里就不再变化. 在二级微扰近似以下，能级变化为

$$E_1=-\frac{3}{4}A\hbar^2+\frac{\left(\frac{eB\hbar}{mc}\right)^2}{\left(-\frac{3}{4}A\hbar^2-\frac{1}{4}A\hbar^2\right)}=-\frac{3}{4}A\hbar^2-\frac{1}{A}\left(\frac{eB}{mc}\right)^2$$

$$E_2=E_4=\frac{1}{4}A\hbar^2$$

$$E_3=\frac{1}{4}A\hbar^2+\frac{\left(\frac{eB\hbar}{mc}\right)^2}{\left(\frac{1}{4}A\hbar^2+\frac{3}{4}A\hbar^2\right)}=\frac{1}{4}A\hbar^2+\frac{1}{A}\left(\frac{eB}{mc}\right)^2$$

(3) $H_B\gg H_s$时，零级近似下，H_s可忽略

$$H_B=\frac{eB}{mc}(S_{ze}-S_{zp})$$

可以看出选$|lms_{ze}s_{zp}\rangle$作本征函数较好

$$H_B\left|\pm\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2}\right\rangle=0$$

则相应能级移动为0

$$H_B\left|\pm\frac{1}{2},\mp\frac{1}{2}\right\rangle=\pm\frac{eB\hbar}{mc}\left|\pm\frac{1}{2},\mp\frac{1}{2}\right\rangle$$

则相应能级移动为$\pm\dfrac{eB\hbar}{mc}$.

(4) 在一般情况下，取$|lmss_z\rangle$为基矢，微扰 Hamilton 量选为$H'=H_s+H_B$，进行简并微扰处理. 由$\det|H'_{mn}-\delta_{mn}E|=0$解出能量修正，同时求出相应的波函数.

6.67 磁场作用远小于精细结构作用时，原子的能量变化

题 6.67 一个原子处在总电子自旋为S，总轨道角动量为L及总角动量为J的状态. (核自旋可以忽略). 原子总角动量的z分量为J_z. 如果一个强度为B的弱磁场加在z方向，这个原子态的能量变化是多少? 设原子与磁场的作用和精细结构作用相比很小. 答案必须用量子数J, L, S, J_z和自然常数明确地表示出来.

解 在系统没有加上磁场之前，系统 Hamilton 量为

$$H=H_0$$

相应的本征波函数为

$$\psi_{nLJM_J}=R_{nLJ}(r_1,\cdots,r_n)\phi_{SLJM_J}$$

1，⋯，n表示原子内不同的电子.

而ϕ_{SLJM_J}是(L^2,S^2,J^2,J_z)的本征态，即

$$\phi_{SLJM_J}=\sum_{M_L}\langle LM_LSM_J-M_L\,|\,JM_J\rangle Y_{LM_L}\Theta_{SM_L-M_L}$$

$\langle LM_LSM_J-M_L\,|\,JM_J\rangle$是通常的 C-G 系数. 相应的非微扰能量为$E_{nSLJ}$.

当对系统加上一个弱磁场后，系统 Hamilton 量为

$$H=H_0+\frac{eB}{2mc}J_z+\frac{eB}{2mc}S_z$$

在B很小的情况下，仍可认为(L^2,S^2,J^2,J_z)为守恒量，则系统波函数仍可近似取为ψ_{nLJM_J}.

由$\dfrac{eB}{2mc}J_z$引起的能量变化为

$$\Delta E_1=M_J\hbar\frac{eB}{2mc},\qquad M_J=J_z$$

而$\dfrac{eB}{2mc}S_z$项则看成在能量属于E_{nLJ}的$(2J+1)$个态所张开的子空间中是对角化的，于是此项引起的能量变化为

$$\frac{eB}{2mc}\langle S_z\rangle=\frac{eB}{2mc}\langle JM_J\,|\,S_z\,|\,JM_J\rangle$$

而

$$\langle JM_J\,|\,S_z\,|\,JM_J\rangle=\sum_{M_L}\hbar(M_J-M_L)\left(\langle LM_LSM_J-M_L\,|\,JM_J\rangle\right)^2$$

所以原子态的总的能量变化为

$$\Delta E=M_J\hbar\omega_L+\hbar\omega_L+\sum_{M_L}(M_J-M_L)\left(\langle LM_LSM_J-M_L\,|\,JM_J\rangle\right)^2$$

式中

$$M_J = J_z, \quad \frac{em}{2mc} = \omega_L$$

6.68 氘核在 $H = \frac{p^2}{2\mu} + V_1(r) + \boldsymbol{\sigma}_\text{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}_\text{n} V_2(r) + \left[\left(\boldsymbol{\sigma}_\text{p}\cdot\frac{\boldsymbol{x}}{r}\right)\left(\boldsymbol{\sigma}_\text{n}\cdot\frac{\boldsymbol{x}}{r}\right) - \frac{1}{3}(\boldsymbol{\sigma}_\text{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}_\text{n})\right]V_3(r)$ 作用下的角动量及视 $V_3(r)$ 为微扰时的能级移动

题 6.68　氘核是质子和中子的束缚态，在质心系中，Hamilton 量为

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + V_1(r) + \boldsymbol{\sigma}_\text{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}_\text{n} V_2(r) + \left[\left(\boldsymbol{\sigma}_\text{p}\cdot\frac{\boldsymbol{x}}{r}\right)\left(\boldsymbol{\sigma}_\text{n}\cdot\frac{\boldsymbol{x}}{r}\right) - \frac{1}{3}(\boldsymbol{\sigma}_\text{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}_\text{n})\right]V_3(r)$$

式中，$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_\text{n} - \boldsymbol{x}_\text{p}$，$r = |\boldsymbol{x}|$，$\boldsymbol{\sigma}_\text{p}$ 和 $\boldsymbol{\sigma}_\text{n}$ 分别是质子和中子的自旋 Pauli 矩阵，μ 是折合质量，$\boldsymbol{p}$ 是 $\boldsymbol{x}$ 的共轭动量. (1) 总角动量 J^2 的量子数和宇称的量子数是好量子数. 证明 $V_3 = 0$ 时，轨道角动量 L^2 量子数和总自旋 S^2 的量子数是好量子数，其中 $\boldsymbol{S} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_\text{p} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_\text{n}$. 并证明：$V_3 \neq 0$ 时，S 依然是好量子数(这能帮助考虑有质子和中子之间自旋的相互交换). (2) 氘核 $J = 1$，宇称为正，L 的可能值是什么？ S 的值呢？(3) 设 V_s 是微扰，证明在零级近似下(即 $V_3 = 0$)，$J_z = 1$ 态的波函数是 $\psi_0(r)|\alpha,\alpha\rangle$. $|\alpha,\alpha\rangle$ 表示 $(S_\text{p})_z = (S_\text{n})_z = 1/2$ 的自旋态，为 $\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$. ψ_0 满足的微分方程是什么？(4) 在一级近似下，V_3 项所造成的能量移动是多少？假设一级近似下的波函数为

$$\psi_0(r)|\alpha,\alpha\rangle + \psi_1(\boldsymbol{x})|\alpha,\alpha\rangle + \psi_2(\boldsymbol{x})\big(|\alpha,\beta\rangle + |\beta,\alpha\rangle\big) + \psi_3(\boldsymbol{x})|\beta,\beta\rangle$$

式中，$|\beta\rangle$ 是 $S_z = -\frac{1}{2}$ 的态为 $\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$，$\psi_0$ 的定义在(3)中. 在 V_s 的一级近似下选出 Schrödinger 方程中正比于 $|\alpha,\alpha\rangle$ 的项，求出 $\psi_1(\boldsymbol{x})$ 满足的微分方程，分离出 $\psi_1(\boldsymbol{x})$ 角度部分并写出径向微分方程.

解　(1) 设 $\hbar = 1$，由于

$$p^2 = -\frac{1}{r}\cdot\frac{\partial^2}{\partial r^2}r - \frac{1}{r^2}\nabla^2_{(\theta,\varphi)}, \quad L^2 = -\nabla^2_{(\theta,\varphi)}$$

所以

$$\left[L^2, p^2\right] = 0$$

$$\left[L^2, V_1 + (\boldsymbol{\sigma}_\text{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}_\text{n})V_2\right] = \left[L^2, V_1\right] + (\boldsymbol{\sigma}_\text{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}_\text{n})\left[L^2, V_2\right] = 0 + (\boldsymbol{\sigma}_\text{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}_\text{n})\cdot 0 = 0$$

$$\left[L^2, H_{(V_3=0)}\right] = 0$$

所以 L 所以是好量子数；另外，由于

$$\boldsymbol{S}_\text{p}\cdot\boldsymbol{S}_\text{n} = \frac{1}{2}\left(S^2 - S_\text{p}^2 - S_\text{n}^2\right) = \frac{1}{2}\left(S^2 - \frac{3}{2}\right)$$

所以

$$\left[\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{p}}\cdot\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{n}}, S^2\right]=0$$

并且当 $V_3\neq 0$ 时

$$\left(\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{p}}\cdot\frac{\boldsymbol{x}}{r}\right)\left(\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{n}}\cdot\frac{\boldsymbol{x}}{r}\right)=\frac{1}{2}\left\{\left[(\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{p}}+\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{n}})\cdot\frac{\boldsymbol{x}}{r}\right]^2-\left(\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{p}}\cdot\frac{\boldsymbol{x}}{r}\right)^2-\left(\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{n}}\cdot\frac{\boldsymbol{x}}{r}\right)^2\right\}=2\left(\boldsymbol{S}\cdot\frac{\boldsymbol{x}}{r}\right)^2-1$$

上式第二步等号利用了公式 $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})$.

由于

$$\left[S^2,\left(\boldsymbol{S}\cdot\frac{\boldsymbol{x}}{r}\right)\right]=\left[S^2,S_i\right]\frac{x_i}{r}=0$$

则

$$\left[S^2,\left(\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{p}}\cdot\frac{\boldsymbol{x}}{r}\right)\left(\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{n}}\cdot\frac{\boldsymbol{x}}{r}\right)\right]=0$$

$$\left[S^2,H\right]=0$$

S 依然是好量子数.

(2) 氘核宇称

$$P=P(p)\cdot P(n)\cdot P_L=(+1)\cdot(+1)\cdot(-1)^L=+1$$

所以 L 为偶数；又因 S 只能是 0 或 1，但 $J=1$ 可知 S 必须是 1，L 是 0 或 2.

(3) 零级近似 $(V_3=0)$ 下，L，S 是好量子数. 考虑能量最低态，$L=0$. 于是 $L_z=0$.

$J_z=L_z+S_z=1$，则 $S_z=1$，于是 $S=1,\ \left(S_{\mathrm{p}}\right)_z=\frac{1}{2},\left(S_{\mathrm{n}}\right)_z=\frac{1}{2}$，由于 $L=0$，空间波函数是球对称的，即 $\psi_0=\psi_0(r)$. 因此 $J_z=1$ 态的波函数是 $\psi_0(r)$

$$H\psi_0(r)|\alpha,\alpha\rangle=E\psi_0(r)|\alpha,\alpha\rangle$$

因为

$$\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{p}}\cdot\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{n}}|\alpha,\alpha\rangle=|\alpha,\alpha\rangle$$

所以

$$H\psi_0(r)|\alpha,\alpha\rangle=\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{1}{r^2}\cdot\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}+V_1(r)\right]\psi_0(r)|\alpha,\alpha\rangle+V_2(r)\psi_0(r)|\alpha,\alpha\rangle$$

则 ψ_0 满足的微分方程为

$$\frac{1}{r^2}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}\psi_0}{\mathrm{d}r}\right)+\left[\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-V_1(r)-V_2(r))\right]\psi_0=0$$

对于 $L\neq 0$ 的态，$J_z=1$ 态的波函数无上述形式.

(4) 一级近似下

$$H=H_0(V_3=0)+H'$$

$$H'=\left[\left(\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{p}}\cdot\frac{\boldsymbol{x}}{r}\right)\cdot\left(\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{n}}\cdot\frac{\boldsymbol{x}}{r}\right)-\frac{1}{3}\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{p}}\cdot\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{n}}\right]V_3(r)$$

$$\psi=\psi_0|\alpha,\alpha\rangle,\qquad \Delta E=\langle\psi|H'|\psi\rangle$$

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\frac{\boldsymbol{x}}{r}=\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\\ \sin\theta\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} & -\cos\theta\end{pmatrix}$$

$$\langle\alpha|\boldsymbol{\sigma}\cdot\frac{\boldsymbol{x}}{r}|\alpha\rangle=\cos\theta$$

则

$$\langle\alpha,\alpha|\left(\boldsymbol{\sigma}_{\rm p}\cdot\frac{\boldsymbol{x}}{r}\right)\left(\boldsymbol{\sigma}_{\rm n}\cdot\frac{\boldsymbol{x}}{r}\right)-\frac{1}{3}\boldsymbol{\sigma}_{\rm p}\cdot\boldsymbol{\sigma}_{\rm n}|\alpha,\alpha\rangle=\cos^2\theta-\frac{1}{3}$$

$$\begin{aligned}\Delta E&=\langle\psi|H'|\psi\rangle\\&=\int|\psi_0|^2V_s(r)\left(\cos^2\theta-\frac{1}{3}\right)\mathrm{d}\boldsymbol{x}\\&=\int_0^{\infty}V_s(r)|\psi_0|^2r^2\mathrm{d}r\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\left(\cos^2\theta-\frac{1}{3}\right)\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi\\&=0\end{aligned}$$

此时 S 守恒，L 不守恒，因此可以设想波函数为自旋 $(S=1)$ 三重态的叠加

$$\psi(x)=\psi_0(r)|\alpha,\alpha\rangle+\psi_1(x)|\alpha,\alpha\rangle+\psi_2(x)\left(|\alpha,\beta\rangle+|\beta,\alpha\rangle\right)+\psi_3(x)|\beta,\beta\rangle$$

$$H\psi=(H_0+H')\psi=\left(E+E^{(1)}+\cdots\right)\psi$$

在一级近似下，利用 $E^{(1)}=\Delta E=0$ 和 $H_0\psi_0|\alpha,\alpha\rangle=E\psi_0|\alpha,\alpha\rangle$，可得

$$\begin{aligned}&H^0\left[\psi_1|\alpha,\alpha\rangle+\psi_2\left(|\alpha,\beta\rangle+|\beta,\alpha\rangle\right)+\psi_3|\beta,\beta\rangle\right]+H'\psi_0|\alpha,\alpha\rangle\\&=E\left[\psi_1|\alpha,\alpha\rangle+\psi_2\left(|\alpha,\beta\rangle+|\beta,\alpha\rangle\right)+\psi_3|\beta,\beta\rangle\right]\end{aligned}$$

先看 $H'\psi_0|\alpha,\alpha\rangle$ 项

$$\begin{aligned}H'\psi_0|\alpha,\alpha\rangle&=V_3(r)\psi_0\left[\left(\boldsymbol{\sigma}_{\rm p}\cdot\frac{\boldsymbol{x}}{r}\right)\left(\boldsymbol{\sigma}_{\rm n}\cdot\frac{\boldsymbol{x}}{r}\right)-\frac{1}{3}(\boldsymbol{\sigma}_{\rm p}\cdot\boldsymbol{\sigma}_{\rm n})\right]|\alpha,\alpha\rangle\\&=V_3(r)\psi_0\left[\begin{pmatrix}\cos\theta\\\sin\theta\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\end{pmatrix}_{\rm p}\otimes\begin{pmatrix}\cos\theta\\\sin\theta\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\end{pmatrix}_{\rm n}-\frac{1}{3}|\alpha,\alpha\rangle\right]\\&=V_3(r)\psi_0\left(\cos^2\theta-\frac{1}{3}\right)|\alpha,\alpha\rangle+V_3(r)\psi_0\\&\quad\cdot\left[\sin^2\theta\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\varphi}|\beta,\beta\rangle,+\cos\theta\sin\theta\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\left(|\alpha,\beta\rangle+|\beta,\alpha\rangle\right)\right]\end{aligned}$$

只考虑方程中正比于 $|\alpha,\alpha\rangle$ 的项即可决定 $\psi_1(\boldsymbol{x})$ 的方程.

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{r^2}\cdot\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}-\frac{L^2}{\hbar^2r^2}\right)\psi_1(x)+V_1(r)\psi_1+V_2(r)\psi_1+V_3(r)\psi_0(r)\left(\cos^2\theta-\frac{1}{3}\right)=E\psi_1$$

令 $\psi_1(x)=R_1(r)\Phi_1(\theta,\varphi)$，从上方程，显然可取

$$\Phi_1(\theta,\varphi)=\cos^2\theta-\frac{1}{3}=\frac{1}{3}\sqrt{\frac{16\pi}{5}}Y_{20}(\theta,\varphi)$$

则

$$L^2\Phi_1=2(2+1)\hbar^2\Phi_1$$

R_1 满足的方程为

$$\frac{1}{r^2}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}r^2\cdot\frac{\mathrm{d}R_1}{\mathrm{d}r}+\left[\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-V_1(r)-V_2(r)-\frac{6}{r^2}\right]R_1=\frac{2\mu}{\hbar^2}V_3(r)\psi_0(r)$$

这里，Φ_1 的归一化因子将影响 R_1 的归一化因子，但它们的乘积将保持不变. 顺便指出，$\psi_1(x)$ 对应 $L=2, L_z=0$. 注意 $H'\psi_0|\alpha,\alpha\rangle$ 中出现的正比于 $|\beta,\beta\rangle$ 的项，可知 $\psi_3(x)$ 对应 $L=2,L_z=2$. 对于 $\psi_2(x)$ ，按题(3)中 $J_z=1$ 的要求(注意，若 $V_3\neq 0$ 则 J_z 也守恒)，可得 $L=2,L_z=1$. 也就是说，由于 V_3 的存在，使氚核的基态成为 $L=0$ 与 $L=2$ 的叠加态，以构成 $J=1,S=1,J_z=1$ 并且宇称为正的态.

6.69 受有心力场作用的两个自旋 1/2 全同粒子系统在微扰 $H'=\lambda[3\boldsymbol{\sigma}(1)\cdot\hat{\boldsymbol{r}}\boldsymbol{\sigma}(2)\cdot\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{\sigma}(1)-\boldsymbol{\sigma}(2)]$ 下的能级修正

题 6.69 设有两个非全同相对论自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子通过不依赖于自旋的有心力场作用而形成的系统，考虑其 $^3P_2$ 和 $^1P_1$ 能级($^3P_2$ ：自旋三重态 $l=1,j=2$ ； $^1P_1$ ：自旋单态 $l=1,j=1$). Hamilton 量增加了一个张量力项 $H'=\lambda[3\boldsymbol{\sigma}(1)\cdot\hat{\boldsymbol{r}}\boldsymbol{\sigma}(2)\cdot\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{\sigma}(1)-\boldsymbol{\sigma}(2)]$ ，可当作微扰来处理. 其中 λ 为常数，$\hat{\boldsymbol{r}}$ 为两粒子连线方向的单位矢量，$\boldsymbol{\sigma}(1)$ 和 $\boldsymbol{\sigma}(2)$ 为粒子 1 和粒子 2 的 Pauli 算符. (1) 利用 H' 同总角动量所有分量对易这一事实，证明微扰后能级高度与 j_z 的本征值 m 无关. (2) 三重态的能级中，j_z 取其最大值 $M=j=2$ 的情形最易于计算其能量. 计算微扰后能量修正 $\Delta E(^3P_2)$. (3) 求 $\Delta E(^1P_1)$.

解 (1) 取 $\hbar=1$ ，利用总自旋 $\boldsymbol{S}=\frac{1}{2}[\boldsymbol{\sigma}(1)+\boldsymbol{\sigma}(2)]$ ，可以将 H' 改写成

$$
\begin{aligned}
H'&=\lambda\left\{\frac{3}{2}\left[(2\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{r}})^2-(\boldsymbol{\sigma}(1)\cdot\hat{\boldsymbol{r}})^2-(\boldsymbol{\sigma}(2)\cdot\hat{\boldsymbol{r}})^2\right]-\frac{1}{2}\left[4S^2-\boldsymbol{\sigma}(1)^2-\boldsymbol{\sigma}(2)^2\right]\right\}\\
&=\lambda\left[6(\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{r})^2-2S^2\right]
\end{aligned}
$$

为了证实 H' 同总角动量所有分量对易，只需以 J_z 为例，证明 $[J_z,H']=0$ 就够了. 首先由 $[S_z,S^2]=0,\ [l_z,S^2]=0$ ，有 $[J_z,S^2]=0$. 其次

$$
\begin{aligned}
[J_z,\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{r}]&=[S_z,\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{r}]+[l_z,\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{r}]\\
&=\left[S_z,\sin\theta\cos\varphi S_x+\sin\theta\sin\varphi S_y+\cos\theta S_z\right]\\
&\quad+\left[l_z,\sin\theta\cos\varphi S_x+\sin\theta\sin\varphi S_y+\cos\theta S_z\right]\\
&=\mathrm{i}\hbar\sin\theta\cos\varphi S_y-\mathrm{i}\hbar\sin\theta\sin\varphi S_x\\
&\quad+\left[-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\sin\theta\cos\varphi S_x+\sin\theta\sin\varphi S_y+\cos\theta S_z\right)\right]\\
&=\mathrm{i}\hbar\sin\theta\cos\varphi S_y-\mathrm{i}\hbar\sin\theta\sin\varphi S_x\\
&\quad+\mathrm{i}\hbar\sin\theta\sin\varphi S_x-\mathrm{i}\hbar\sin\theta\cos\varphi S_y=0
\end{aligned}
$$

于是

$$
\left[J_z,(\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{r})^2\right]=(\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{r})[J_z,\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{r}]+[J_z,\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{r}](\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{r})=0
$$

所以 $[J_z,H']=0$ ，同理 $[J_x,H']=[J_y,H']=0$.

特别地，$J_+=J_x+\mathrm{i}J_y$ 也与 H' 对易. J_+ 具有性质

$$J_+|j,m\rangle = a|j,m+1\rangle$$

设有两个微扰前(简并)的态 $|j,m_1\rangle$ 和 $|j,m_2\rangle$，$m_2 = m_1 + 1$，微扰后能量高度为 E_1 和 E_2，考虑

$$\begin{aligned}0 &= \langle j,m_2|[J_+,H_0+H']|j,m_1\rangle \\ &= \langle j,m_2|J_+(H_0+H')|j,m_1\rangle - \langle j,m_2|(H_0+H')J_+|j,m_1\rangle \\ &= (E_1-E_2)\langle j,m_2|J_+|J,m_1\rangle \\ &= a(E_1-E_2)\end{aligned}$$

矩阵元 $a \neq 0$，只有 $E_1 = E_2$，即微扰后能级高度与 m 无关.

(2)
$$\Delta E(^3P_2) = \langle j=2,m=2|H'|j=2,m=2\rangle$$

而

$$|j=2,m=2\rangle = |l=1,m_l=1\rangle|S=1,m_s=1\rangle$$

$$\Delta E(^3P_2) = \int \mathrm{d}\Omega Y_{11}^*(\theta,\varphi)\langle S=1,m_s=1|H'|S=1,m_s=1\rangle Y_{11}(\theta,\varphi) = -\frac{2}{5}\lambda$$

(3) 对 $^1P_1$，有 $S=0, m_s=0, H'=0$. 所以 $\Delta E(^1P_1)=0$

6.70　氢原子的超精细结构态在与时间相关的弱磁场中的变化

题 6.70　一个氢原子最初处在它的绝对基态，超精细结构态 $F=0$.(F 是质子自旋 $\boldsymbol{I}$，电子自旋 $\boldsymbol{s}$ 及轨道角动量 $\boldsymbol{L}$ 之和). $F=0$ 态与 $F=1$ 态以一个微小的能级差分开. 一个弱的、与时间有关的磁场加在系统上. 它沿 z 方向，并具有如下形式

$$\begin{cases} B_z = 0, & t<0 \\ B_z = B_0\mathrm{e}^{-\gamma t}, & t>0 \end{cases}$$

式中，B_0 和 γ 是常数. (1) 计算在经过很长时间后，磁场消失时氢原子留在超精细结构态 $F=1$ 概率；(2) 解释为什么在解决这个问题时，你可以忽略质子与磁场的作用.

解　(1) 当考虑氢原子的超精细结构时，氢原子系统的 Hamilton 量为

$$H = H_0 + f(r)\boldsymbol{\sigma}_\mathrm{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}_\mathrm{e}$$

式中，H_0 是 $l=0$ 时考虑到氢原子超精细结构的 Hamilton 量；$f(r)\boldsymbol{\sigma}_\mathrm{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}_\mathrm{e}$ 是超精细构结能；$\boldsymbol{\sigma}_\mathrm{p}$ 和 $\boldsymbol{\sigma}_\mathrm{e}$ 分别为质子自旋与电子自旋的 Pauli 矩阵.

当氢原子处在绝对基态时，$L=0, j=s=\dfrac{1}{2}$，而超精细结构态 $F=0$ 及 $F=1$ 分别对应于质子和电子自旋反平行和平行的情况.

初始时系统波函数为

$$\psi(\boldsymbol{r},F) = R_{10}Y_{00}(\theta,\varphi)\Theta_{00}$$

若以 α,β 表示 $\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ 旋量，则

$$\Theta_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}(-\alpha_\mathrm{p}\beta_\mathrm{e} + \alpha_\mathrm{e}\beta_\mathrm{p})$$

为自旋单态.

当$t>0$时，系统上加上弱磁场$B_z=B_e e^{-rt}$

$$H=H_0+f(r)\boldsymbol{\sigma}_p\cdot\boldsymbol{\sigma}_e+\frac{\hbar eB_z}{2\mu c}\sigma_{ez}$$

式中，忽略了质子与磁场的作用.

设$t>0$时，系统波函数为

$$\psi(r,F,t)=R_{10}(r)Y_{00}\left[C_1(t)\Theta_{00}+C_2(t)\Theta_{11}+C_3(t)\Theta_{10}+C_4(t)\Theta_{1-1}\right]$$

式中，$\Theta_{11},\Theta_{10},\Theta_{1-1}$为自旋三重态. 所以，$t$时刻系统处在超精细结构态$F=1$的概率为

$$A(t)=1-\left|C_1(t)\right|^2$$

重写初始条件$C_1(0)=1,\ C_2(0)=C_3(0)=C_4(0)=0$. 由 Schrödinger 方程$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=H\psi$及$\boldsymbol{\sigma}_p\cdot\boldsymbol{\sigma}_e\Theta_{00}=-3\Theta_{00}$，$\boldsymbol{\sigma}_p\cdot\boldsymbol{\sigma}_e\Theta_{1m_s}=\Theta_{1m_s}$可得方程

$$\begin{aligned}&i\hbar R_{10}(r)Y_{00}\left(\frac{dC_1}{dt}\Theta_{00}+\frac{dC_2}{dt}\Theta_{11}+\frac{dC_3}{dt}\Theta_{10}+\frac{dC_4}{dt}\Theta_{1-1}\right)\\&=R_{10}(r)Y_{00}\left\{\left[E_{10}-3f(a_0)\right]C_1(t)\Theta_{00}+\left[E_{10}+f(a_0)\right]\left[C_2(t)\Theta_{11}\right.\right.\\&\left.\left.+C_3\Theta_{10}+C_4(t)\Theta_{1-1}\right]\right\}+R_{10}(r)Y_{00}\mu_0B_z\left[C_3(t)\Theta_{00}+C_2(t)\Theta_{11}\right.\\&\left.+C_1(t)\Theta_{10}-C_4(t)\Theta_{1-1}\right]\end{aligned}$$

由此可得$C_1(t)$及$C_3(t)$的联立方程

$$\begin{cases}i\hbar\dfrac{d}{dt}C_1(t)=\left[E_{10}-3f(a_0)\right]C_1(t)+C_3(t)\mu_0B_0e^{-rt}\\ i\hbar\dfrac{d}{dt}C_2(t)=\left[E_{10}+f(a_0)\right]C_3(t)+C_1(t)\mu_0B_0e^{-rt}\end{cases}$$

因为$f(a_0)\ll E_{10}$是超精细结构的能量，在求$C_1(t)$时可略去. 解方程

$$C_1(t)=\frac{1}{2}e^{-i\frac{E_{1n}}{\hbar}t}\left[\exp\left[\frac{i\mu_0B_0}{r\hbar}(1-e^{-rt})\right]+\exp\left[-\frac{i\mu_0B_0}{r\hbar}(1-e^{-rt})\right]\right]$$

当$t\to\infty$时，$\left|C_1(t)\right|^2=\cos^2\left(\frac{\mu_0B_0}{r\hbar}\right)$，则

$$A(t)\Big|_{t\to\infty}=1-\cos^2\left(\frac{\mu_0B_0}{r\hbar}\right)=\sin^2\left(\frac{\mu_0B_0}{r\hbar}\right)$$

此即为氢原子留在$F=1$态的概率.

(2) 因为质子磁矩与电子磁矩之比为1/1840，所以质子磁矩与磁场的相互作用可以略去.

6.71 受到电场$\boldsymbol{E}=E_0\sin\omega t\boldsymbol{e}_z$作用后，中心场中的粒子 S，P 态被占据的概率

题 6.71 在中心场中无自旋的非相对论粒子被制备处于 S 态，该态同一 P 能级$(m_l=0,\pm1)$在能量上简并. 在时刻$t=0$，加上电场$\boldsymbol{E}=E_0\sin\omega t\boldsymbol{e}_z$. 忽略向上述态之外的态

的跃迁概率，但是不做进一步的近似，计算在时刻t，这四个态的每个被占据的概率(用$\hat{z}$的非零矩阵元表示).

解　选这四个态作基，并取简并能量$E=0$，Hamilton 量为

$$H=H_0+H',\qquad H'=-gE\cdot r=-gE_0 z\sin\omega t$$

用矩阵表示

$$H'=\begin{matrix} & |00\rangle & |10\rangle & |1-1\rangle & |11\rangle \\ \langle 00| & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \langle 10| & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \langle 1-1| & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \langle 11| & 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix}\left[-gE_0\sin\omega t\langle 00|z|10\rangle\right]$$

在此基下的波函数设为$\Psi=(x_1,x_2,x_3,x_4)'$，初始条件$\Psi(t=0)=(1,0,0,0)'$. 由 Schrödinger 方程得

$$i\hbar\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\end{pmatrix}=-\lambda\sin\omega t\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\end{pmatrix}\tag{1}$$

$$i\hbar\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}x_3\\x_4\end{pmatrix}=0\tag{2}$$

式中，$\lambda\equiv gE_0\langle 00|z|10\rangle$是实数.

由式(2)及初始条件得

$$\begin{pmatrix}x_3\\x_4\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x_3\\x_4\end{pmatrix}_{t=0}=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}$$

故在时刻t, P能级的$m_l=\pm1$态的占据概率是 0. 将式(1)对角化，为此在式(1)中选新基

$$\varphi_1=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix},\qquad \varphi_2=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$$

在此新基下，Ψ的前两个分量(构成ψ)为

$$\psi=\begin{pmatrix}x_1\\x_2\end{pmatrix}_{\text{旧}}=\frac{x_1}{\sqrt{2}}(\varphi_1+\varphi_2)+\frac{x_2}{\sqrt{2}}(\varphi_1-\varphi_2)$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}x_1+x_2\\x_1-x_2\end{pmatrix}_{\text{新}}\equiv\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}_{\text{新}}$$

于是式(1)成为(略去脚标“新”字)

$$\begin{cases}i\hbar\dfrac{d}{dt}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=-\lambda\sin\omega t\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}\\ \begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}_{t=e}=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}\end{cases}\tag{3}$$

由式(6.85)解出

$$\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}\exp\left[\dfrac{i\lambda}{\hbar\omega}(1-\cos\omega t)\right]\\ \exp\left[-\dfrac{i\lambda}{\omega t}(1-\cos\omega t)\right]\end{pmatrix}$$

$$\psi=\begin{pmatrix}x_1\\x_2\end{pmatrix}_{旧}=\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}_{新}=a\varphi_1+b\varphi_2=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}a+b\\a-b\end{pmatrix}_{旧}=\begin{pmatrix}\cos\left[\dfrac{\lambda}{\hbar\omega}(1-\cos\omega t)\right]\\ \mathrm{i}\sin\left[\dfrac{\lambda}{\hbar\omega}(1-\cos\omega t)\right]\end{pmatrix}_{旧}$$

于是，在时刻t，占据各态的概率分别为

$$P_s(t)=\cos^2\left[\frac{gE_0\langle 00|z|10\rangle}{\hbar\omega}(1-\cos\omega t)\right]$$

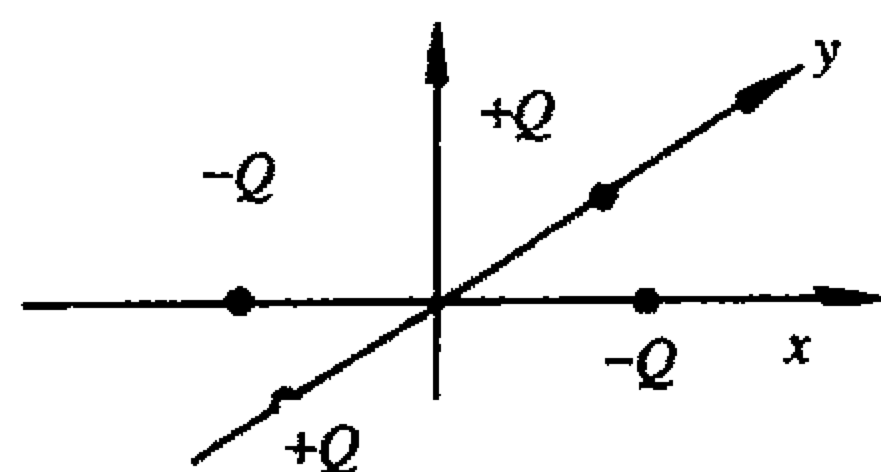
$$P_{p\,(m_l=e)}(t)=\sin^2\left[\frac{gE_0\langle 00|z|10\rangle}{\hbar\omega}(1-\cos\omega t)\right]$$

$$P_{p(m_l=\pm1)}(t)=0$$

由中心场波函数$R_{nl}\mathrm{Y}_{lm}(0\cdot\varphi)$易算$\langle 00|z|10\rangle$，它是实数.

6.72　$H=\alpha\left(L_x^2-L_y^2\right)/\hbar^2+\beta BL_z/\hbar$ 在基$|L,M_L\rangle$上的矩阵元与被作用离子的能级

题 6.72　一个某种原子的离子处于自由空间时，其$L=1,S=0$. 将该离子嵌入(在$x=y=z=0$处)一个晶体中，其局部环境如题图 6.72(a)所示的 4 个点电荷. 应用 Wigner-Eckart 定理可以证明，这一环境引起的有效微扰 Hamilton 量可以写成如下形式(这个结论不必证明).



题图 6.72(a)

$$H_1=\frac{\alpha}{\hbar^2}\left(L_x^2-L_y^2\right)$$

式中，L_x和L_y分别是轨道角动量算符的x分量和y分量，α是个常数. 此外，在z方向加上一个磁场，引起另一个微扰

$$H_z=\frac{\beta B}{\hbar}L_z$$

式中，L_z是角动量算符的z分量，β是个常数. (1) 用轨道角动量的升、降算符L_+和L_-表示微扰 Hamilton 量$H'=H_1+H_2$. (2) 求微扰 Hamilton 量在由三个态$|1,0\rangle,|1,1\rangle$和$|1,-1\rangle$构成的基$|L,M_L\rangle$上的矩阵元. (3) 求离子的能级，并将能级表示成B的函数. 将你的结果绘一张较仔细的草图. (4) $B=0$时描述该离子的本征函数是什么.

解　(1) 根据定义$L_\pm=L_x\pm\mathrm{i}L_y$，有

$$[L_+,L_-]=2\hbar L_x$$

$$L_x^2-L_y^2=\frac{1}{4}(L_++L_-)^2+\frac{1}{4}(L_+-L_-)^2=\frac{1}{2}(L_+^2+L_-^2)$$

于是

$$H'=\frac{\alpha}{\hbar^2}(L_x^2-L_y^2)+\frac{\beta B}{\hbar}L_z=\frac{\alpha}{2\hbar^2}(L_+^2+L_-^2)+\frac{\beta B}{2\hbar^2}(L_+L_--L_-L_+)$$

(2) 根据公式

$$L_{\pm}|L,M_L\rangle=\hbar\sqrt{L(L+1)-M_L(M_L\pm1)}|L,M_L\pm1\rangle$$
$$L_z|L,M_L\rangle=M_L\hbar|L,M_L\rangle$$

可以求出 H' 在基底 $\{|1,1\rangle,|1,0\rangle,|1,-1\rangle\}$ 上的矩阵元为

$$H'=\begin{pmatrix}\beta B & 0 & \alpha\\ 0 & 0 & 0\\ \alpha & 0 & -\beta B\end{pmatrix}$$

(3) 微扰能量由下式决定

$$\begin{pmatrix}\beta B-E & 0 & \alpha\\ 0 & -E & 0\\ \alpha & 0 & -\beta B-E\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\\ c\end{pmatrix}=0$$

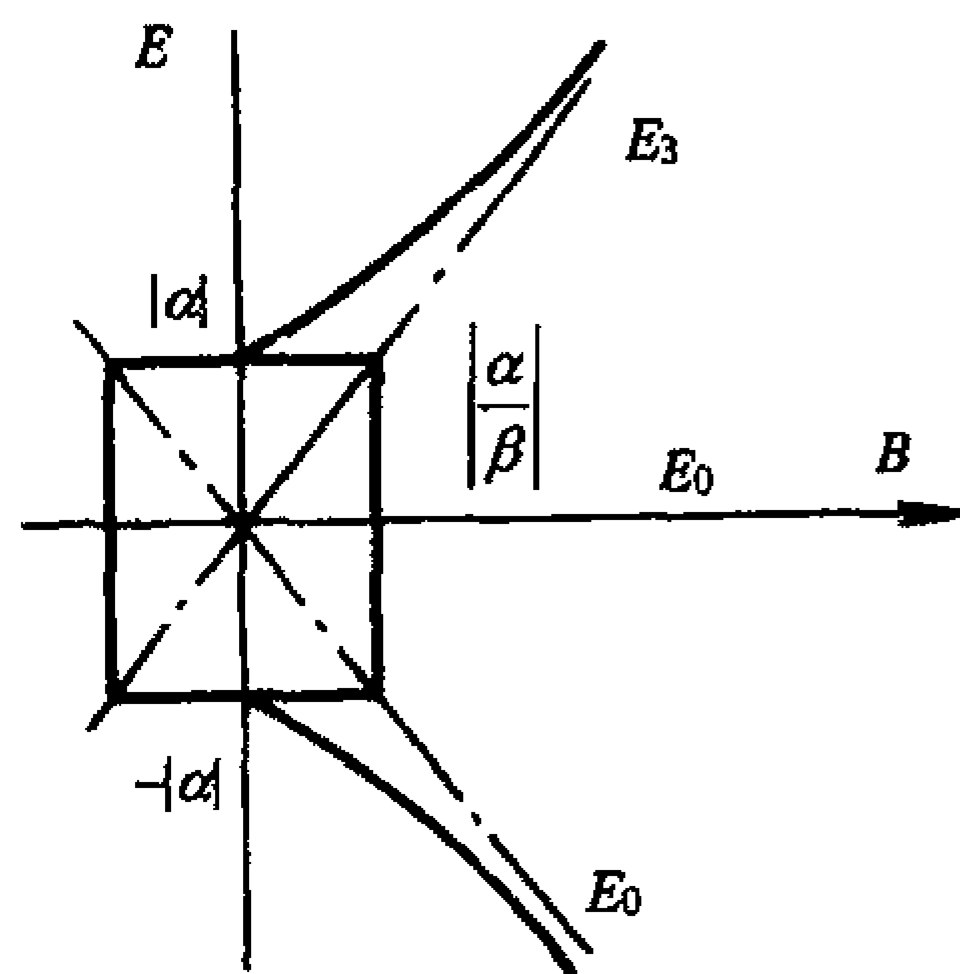
相应的久期方程为

$$\begin{vmatrix}\beta B-E & 0 & \alpha\\ 0 & -E & 0\\ \alpha & 0 & -\beta B-E\end{vmatrix}$$
$$=E\left(\sqrt{(\beta B)^2+\alpha^2}-E\right)\left(\sqrt{(\beta B)^2+\alpha^2}+E\right)=0$$

解之，即得微扰能级

$$E_1=-\sqrt{(\beta B)^2+\alpha^2},\quad E_2=0,\quad E_3=\sqrt{(\beta B)^2+\alpha^2}$$

这些结果如题图 6.72(b)所示.



题图 6.72(b)

(4) $B=0$ 时，能级为

$$E_1=-\alpha,\quad E_2=0,\quad E_3=\alpha$$

相应的能量本征矢为

$$\begin{pmatrix}a\\ b\\ c\end{pmatrix}_{(1)}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-1\\ 0\\ 1\end{pmatrix},\quad \begin{pmatrix}a\\ b\\ c\end{pmatrix}_{(2)}=\begin{pmatrix}0\\ 1\\ 0\end{pmatrix},\quad \begin{pmatrix}a\\ b\\ c\end{pmatrix}_{(3)}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ 0\\ 1\end{pmatrix}$$

描述离子的波函数为

$$|E_1=-\alpha\rangle=-\frac{1}{\sqrt{2}}|11\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}|1-1\rangle$$
$$|E_2=0\rangle=|10\rangle$$
$$|E_3=\alpha\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}|11\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}|1-1\rangle$$

6.73 电子偶素的四种自旋态能量对磁场的依赖关系及磁场撤去后留在单态的概率

题 6.73 处在磁场 B 中的电子偶素(电子与正电子间的束缚态)等效 Hamilton 量自旋相关部分可以写成

$$H_{\text{spin}}=A\boldsymbol{\sigma}_{\text{e}}\cdot\boldsymbol{\sigma}_{\text{p}}+\mu_{\text{B}}B(\sigma_{\text{ez}}-\sigma_{\text{pz}})$$

式中，$\boldsymbol{\sigma}_e$ 和 $\boldsymbol{\sigma}_p$ 为电子和正电子的 Pauli 矩阵，μ_B 是 Bohr 磁子. (1) 在零磁场时单态能量处在三重态以下 $8\times10^{-4}\text{eV}$，A 值为多少？(2) 用图说明四个自旋态的每一个态能量对磁场 B 的依赖，包括弱场和强场二种情况. (3) 若电子偶素原子在一强磁场中处在其能量最低态，且场被瞬时地撤去，在单态找到原子的概率为多少？(4) 当场是缓慢撤除时，(3) 的结果将会怎样改变？

解 (1) $B=0$ 时

$$\langle H_{\text{spin}}\rangle = A\langle F'm_F'|\boldsymbol{\sigma}_e\cdot\boldsymbol{\sigma}_p|Fm_F\rangle$$

式中，$\boldsymbol{F}=\boldsymbol{S}_e+\boldsymbol{S}_p$. 因为

$$\boldsymbol{\sigma}_e\cdot\boldsymbol{\sigma}_p=\frac{2}{\hbar^2}\left(\boldsymbol{F}^2-\boldsymbol{S}_e^2-\boldsymbol{S}_p^2\right)$$

$$\langle H_{\text{spin}}\rangle = 2A\left[F(F+1)-S_e(S_e+1)-S_p(S_p+1)\right]\delta_{F'F}\delta_{m_F'm_F}$$

三重态 $F=1$，$E_{F=1}=A$；单态 $F=0$，$E_{F=0}=-3A$. 因此，$E_{F=1}-E_{F=0}=4A=8\times10^{-4}\text{eV}$. $A=2\times10^{-4}\text{eV}$.

(2) 利用耦合基到非耦合基变换关系

$$\begin{cases}|F=1,m_F=1\rangle=\left|S_e=\frac12,m_{se}=\frac12,S_p=\frac12,m_{sp}=\frac12\right\rangle\\ |F=1,m_F=0\rangle=\frac{1}{\sqrt2}\left\{\left|S_e=\frac12,m_{se}=\frac12,S_p=\frac12,m_{sp}=-\frac12\right\rangle\right.\\ \qquad\left.+\left|S_e=\frac12,m_{se}=-\frac12,S_p=\frac12,m_{sp}=\frac12\right\rangle\right\}\\ |F=1,m_F=-1\rangle=\left|S_e=\frac12,m_{se}=-\frac12,S_p=\frac12,m_{sp}=-\frac12\right\rangle\\ |F=0,m_F=0\rangle=\frac{1}{\sqrt2}\left\{\left|S_e=\frac12,m_{se}=\frac12,S_p=\frac12,m_{sp}=-\frac12\right\rangle\right.\\ \qquad\left.-\left|S_e=\frac12,m_{se}=-\frac12,S_p=\frac12,m_{sp}=\frac12\right\rangle\right\}\end{cases}$$

可求出，在次序 $|1,1\rangle,|1,-1\rangle,|1,0\rangle,|0,0\rangle$ 下 H_{spin} 矩阵为

$$\begin{pmatrix}A&0&0&0\\0&A&0&0\\0&0&A&2\mu_B B\\0&0&2\mu_B B&-3A\end{pmatrix}$$

该矩阵本征值为

$$E_1=E_2=A$$

$$E_3=-A+2\sqrt{A^2+\mu_B^2B^2}$$

$$E_4=-A-2\sqrt{A^2+\mu_B^2B^2}$$

当 B 是弱场时，可将 $\mu_B B(\sigma_{ez}-\sigma_{pz})$ 看为微扰，一级微扰为零，能量与 B^2 成正比在二

级微扰下；当 B 是强场时，为线性关系.

(3) 电子偶素处于强磁场中能量最低态，即

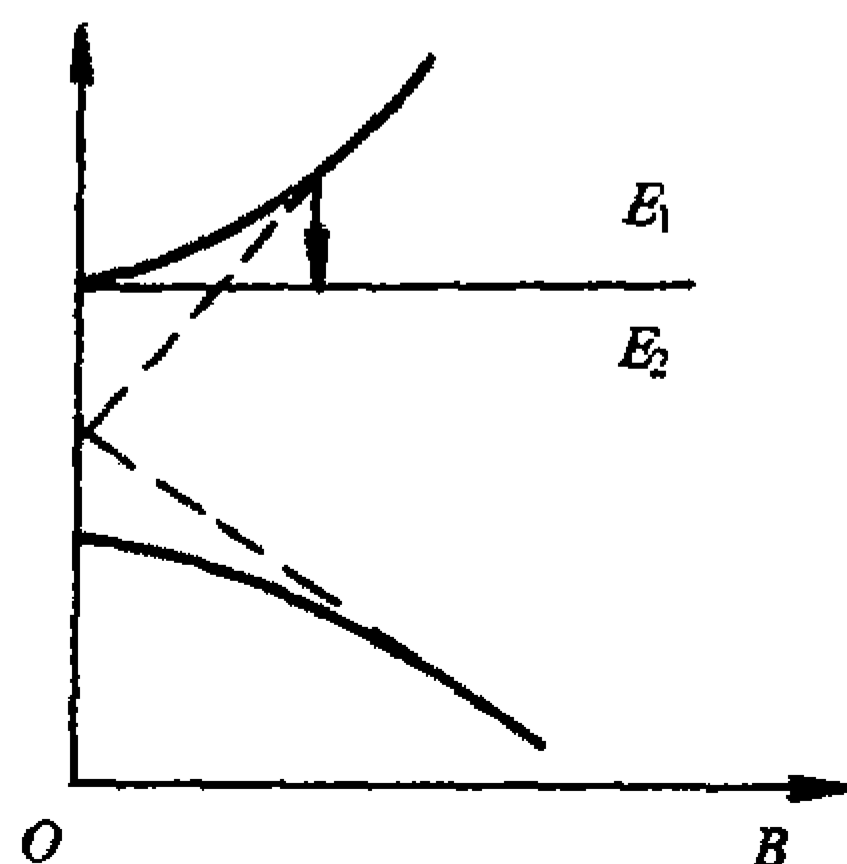
$$E=-A-2\mu_B B$$

的本征态，为

$$\left|m_{se}=-\frac{1}{2},m_{sp}=\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1,0\rangle-|0,0\rangle\right)$$

这里将 $A\boldsymbol{\sigma}_e\cdot\boldsymbol{\sigma}_p$ 看为微扰. 突然撤去磁场，原子处在 $|F=0,m_F=0\rangle$ 态的概率为

$$P=\left|\left\langle 0,0\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right.\right\rangle\right|^2=\frac{1}{2}$$



题图 6.73

(4) 若缓慢撤去磁场，系统不发生状态跃迁，原子仍处于 $\left|\frac{1}{2},\frac{-1}{2}\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$ 态. 能量为 $E=-A$.

6.74 电子偶素基态半径及其在自旋-自旋作用和磁场作用下的行为

题 6.74 电子偶素是由电子，正电子之间通过 Coulomb 引力束缚在一起而构成. (1) 基态的半径是多少？基态结合能是多少？(2) 由于其自旋-自旋相互作用，基态的单态和三重态发生分裂，使得单态比三重态低 10^{-3}eV . 解释电子偶素在磁场中的行为. 画出能级图来说明与磁场的关系.

解 (1) 对于氢原子有

$$a_0=\frac{\hbar^2}{\mu e^2}\approx 0.53\,\text{Å}$$

$$E_I=\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}\approx 13.6\text{eV}$$

式中

$$\mu=\frac{m_e m_p}{m_e+m_p},\qquad V(r)=-\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}$$

对于任意类氢体系

$$V'(r)=-\frac{Ze^2}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}$$

$$\mu'=\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}$$

只要作 $e^2\to Ze^2,\mu\to\mu'$ 变换，就可以求得相应的物理量. 对于电子偶素，$\mu'=m_e/2,Z=1$. 所以

$$a_0'=\frac{\hbar^2}{\mu'e^2}=\frac{a_0\mu}{\mu'}=2a_0\approx 1(\text{Å})$$

$$E_I'=\frac{\mu'e^4}{2\hbar^2}=\frac{\mu'E_I}{\mu}=\frac{1}{2}E_I\approx 6.8(\text{eV})$$

(2) 选本征态为$|0,0,S,S_z\rangle$，取微扰 Hamilton 量为

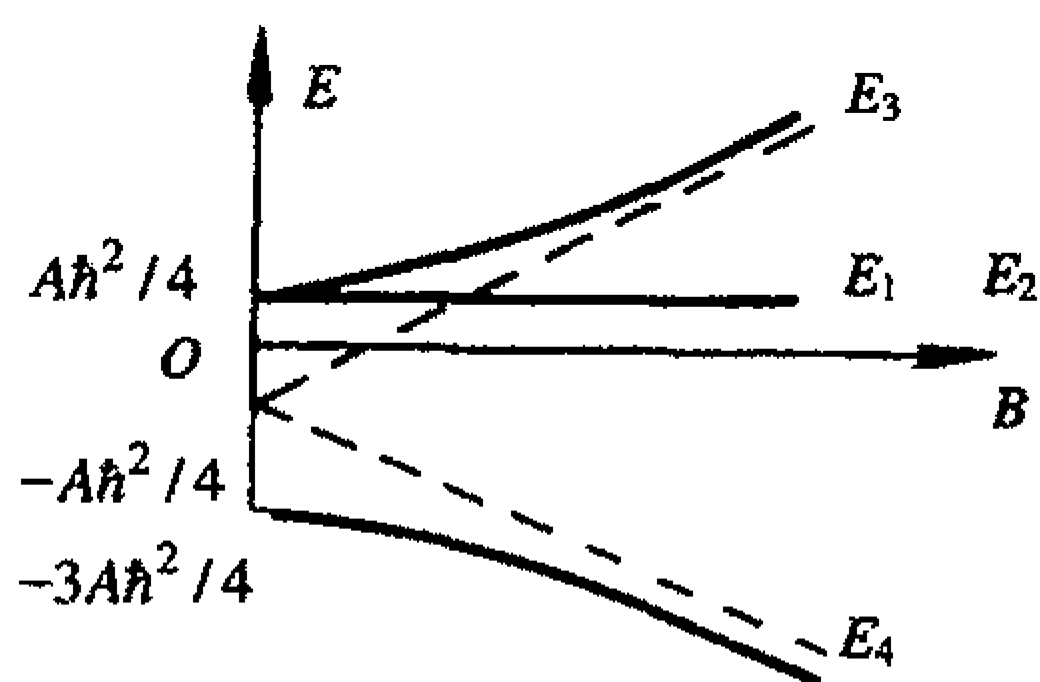
$$H' = A\boldsymbol{S}_e \cdot \boldsymbol{S}_p + \frac{eB}{mc}(S_{ze} - S_{zp}), \qquad A = \frac{10^{-3}\text{eV}}{\hbar^2}$$

则微扰矩阵元为

$$H_{mn}^1 = \begin{pmatrix} \frac{A\hbar^2}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{A\hbar^2}{4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{A\hbar^2}{4} & -\hbar\frac{eB}{mc} \\ 0 & 0 & -\hbar\frac{eB}{mc} & -\hbar\frac{eB}{mc} \end{pmatrix} \begin{matrix} (1,1) \\ (1,-1) \\ (1,0) \\ (0,0) \end{matrix}$$

$$\qquad\qquad (1,1) \quad (1,-1) \quad (1,0) \quad (0,0)$$

由此解得微扰能量为(题图 6.74)



题图 6.74

$$E_1 = E_2 = \frac{A\hbar^2}{4}$$

$$E_3 = -\frac{A\hbar^2}{4} + \sqrt{\frac{A^2\hbar^4}{2^2} + \hbar^2\left(\frac{eB}{mc}\right)^2}$$

$$E_4 = -\frac{A\hbar^2}{4} - \sqrt{\left(\frac{A\hbar^2}{2}\right) + \hbar^2\left(\frac{eB}{mc}\right)^2}$$

由上式可以看出弱磁场时，能级是在超精细分裂的基础上再分裂；而强磁场则破坏了原来的超精细能级结构.

6.75 估计处于基态的氦原子的磁化率

题 6.75 估计一处于基态的氦原子的磁化率. 它是抗磁性的还是顺磁性的?

解 设有一外加均匀磁场$\boldsymbol{H} = H_0\hat{e}_z$. (其中$H_0$是一常数)作用在氦原子上.

取$\boldsymbol{A} = H_0 x\hat{e}_y$可以验证$\boldsymbol{H} = \nabla \times \boldsymbol{A}$.

$$H = \sum_{i=1}^{2} \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{P}_i - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 - \boldsymbol{\mu}_J \cdot \boldsymbol{H}$$

$$\boldsymbol{\mu}_J = 0, \qquad \text{因氦原子处于基态}$$

所以

$$H = \sum_{i=1}^{2} \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{P}_i - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 = \sum_{i=1}^{2} \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{P}_i - \frac{e}{c}H_0 x_i \hat{e}_y\right)^2, \qquad m,e \text{ 分别为电子质量和电荷}$$

电磁化率公式$\chi = -4\pi \frac{\partial^2}{\partial H^2} E\Big|_{H=0}$，得处于基态的氦原子磁化率为

$$\chi = -4\pi \frac{\partial^2}{\partial H^2} E_{\text{He基态}} \Big|_{H=0}$$
$$= -4\pi \frac{\partial^2}{\partial H^2} \langle \text{He基态} | H | \text{He 基态} \rangle \big|_{H=0}$$
$$= -4\pi \frac{e^2}{2mc^2} 2 \langle \text{He基态} | x^2 | \text{He 基态} \rangle$$
$$= -4\pi \frac{e^2}{mc^2} \overline{x_0^2}$$

近似有

$$\overline{x_0^2} = \frac{1}{3} r^2_{\text{He基态}}$$

$$\chi \approx -\frac{4\pi}{c^2} \cdot \frac{e^2 r^2_{\text{He 基态}}}{3m}$$

以上使用的是 Gauss 制，在 S I 制中

$$\chi \approx -\frac{\mu_0 e^2 r^2_{\text{He基态}}}{3m}$$

$r^2_{\text{He 基态}}$ 表示处于基态氦原子中电子离核平方平均距离.

由于 $\chi < 0$，所以氦原子是抗磁的.

6.76　氢原子在电磁场中的定态方程及磁场为微扰势时基态能级移动与磁矩

题 6.76　一个不具有永久磁矩的原子称为是抗磁的. 本题的目的，是在忽略电子和质子的自旋条件下，计算氢原子在弱磁场 $\boldsymbol{B}$ 中的诱导抗磁矩. (1) 写下质量为 m，电荷为 q 的粒子处于电磁场 $(\Phi, \boldsymbol{A})$ 中的非相对论性 Hamilton 量. (2) 已知对于一个均匀磁场，满意的矢势 $\boldsymbol{A}$ 可以取为 $\boldsymbol{A} = -\frac{1}{2} \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{B}$，用这一事实写下氢原子的定态 Schrödinger 方程. 假设质子质量无穷大，因此可以忽略质心运动. (3) 将来自于磁场的项当作微扰处理，计算由于存在磁场引起的基态能量移动. (4) 计算每个原子的诱导抗磁矩.

解　(1) 质量为 m 电荷为 q 的粒子处于电磁场 $(\Phi, \boldsymbol{A})$ 中时，其 Hamilton 量为

$$H = \frac{1}{2m} \left(\boldsymbol{P} - \frac{q}{c} \boldsymbol{A} \right)^2 + q\Phi$$

(2) 忽略质心运动，则处于均匀磁场 $\boldsymbol{B}$ 中的氢原子满足如下定态 Schrödinger 方程

$$\left[\frac{1}{2m_e} \left(\boldsymbol{P} + \frac{e}{2c} \boldsymbol{B} \times \boldsymbol{r} \right) - \frac{e^2}{r} \right] \psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r})$$

注意到

$$\boldsymbol{P} \cdot (\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{r}) - (\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{r}) \cdot \boldsymbol{P} = -i\hbar \nabla \cdot (\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{r})$$
$$= -i\hbar (\nabla \times \boldsymbol{B}) \cdot \boldsymbol{r} + i\hbar \boldsymbol{B} \cdot (\nabla \times \boldsymbol{r}) = 0$$
$$\boldsymbol{P} \cdot (\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{r}) = \boldsymbol{B} \cdot (\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{P}) = \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{L}$$

若取 $\boldsymbol{B}$ 的方向为极轴($\boldsymbol{B}=B\boldsymbol{e}_z$)，则定态 Schrödinger 方程可化为

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2-\frac{e^2}{r}-\frac{\mathrm{i}eB\hbar}{2m_ec}\cdot\frac{\partial}{\partial\varphi}+\frac{e^2B^2}{8m_ec^2}r^2\sin^2\theta\right)\psi(r,\theta,\varphi)=E\psi(r,\theta,\varphi)$$

式中

$$-\frac{\mathrm{i}eB\hbar}{2m_ec}\cdot\frac{\partial}{\partial\varphi}=\frac{eB}{2m_ec}L_z$$

(3) 微扰的一般形式为

$$H'=\frac{eB}{2m_ec}L_z+\frac{e^2B^2}{8m_ec^2}r^2\sin^2\theta$$

$$\begin{aligned}\Delta E&=\langle 100|H'|100\rangle\\&=\frac{e^2B^2}{8m_ec^2}\left[2\pi\int_0^\pi\sin\theta\mathrm{d}\theta\int_0^\infty r^2\mathrm{d}r\frac{1}{\pi}\left(\frac{1}{a}\right)^3\mathrm{e}^{-2r/a}r^2\sin^2\theta\right]\\&=\frac{e^2B^2}{3m_ec^2a^3}\int_0^\infty r^4\mathrm{e}^{-2r/a}\mathrm{d}r=\frac{a^2e^2B^2}{4m_ec^2}\end{aligned}$$

对于基态，$l=0$，H' 中第一项无贡献.

(4) 上述能级移动相当于一磁偶极子在磁场中的能量.

$$\Delta E=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}$$

$$\boldsymbol{\mu}=-\frac{e^2a^2}{4m_ec^2}\boldsymbol{B}$$

$\boldsymbol{\mu}$ 反平行于 $\boldsymbol{B}$，故称抗磁性.

6.77 估计氢原子的超精细结构的磁化率及氦原子基态极化率

题 6.77 原子的磁极化率定义如下

$$\alpha_H=-\left.\frac{\partial^2E(H)}{\partial H^2}\right|_{H=0}$$

式中，$E(H)$ 是原子在一匀强外磁场中的能量. (1) 估计氢原子的超精细基态的磁极化率，其基态为 $F=0$, 1s . (2) 估计氦原子基态 $(1\mathrm{s})^2$ 的磁极化率(必须给出 α_H 的符号).

解 (1) 磁场 $\boldsymbol{H}$ 很弱时，利用二级微扰论对基态 $F=0$, 1s 进行能量的二级修正. 微扰 Hamilton 量为 $H'=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{H}$. 一级微扰对 α_H 是没有贡献的，所以

$$E^{(2)}(H)=\sum_{m=-1}^{1}\frac{|\langle F=1,m|-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{H}|F=0\rangle|^2}{E_{F=0}-E_{F=1}}$$

m 是 $\boldsymbol{F}$ 在 z 轴上投影的量子数.

因 $\boldsymbol{H}$ 在 z 轴上，有

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{H}&=(g_e\mu_BS_z+g_p\mu_pI_z)H\\&=\left[\frac{1}{2}(g_e\mu_B+g_p\mu_p)(S_z+I_z)+\frac{1}{2}(g_e\mu_B-g_p\mu_p)(S_z-I_z)\right]H\end{aligned}$$

$$\sum_{m=-1}^{1}\frac{\left|\langle F=1,m|-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{H}|F=0\rangle\right|^2}{E_{F=0}-E_{F=1}}$$

$$=H^2\sum_{m=-1}^{1}\frac{\left|\langle F=1,m|\frac{1}{2}(g_e\mu_B-g_p\mu_p)(S_z-I_z)|F=0\rangle\right|^2}{E_{F=0}-E_{F=1}}$$

因 (S_z-I_z) 是反对称的，因而只有 $m=0$ 时矩阵元不为 0. 所以有

$$E^{(2)}(H)=H^2\frac{\left|\langle F=1,m=0|\frac{1}{2}(g_e\mu_B-g_p\mu_p)(S_z-I_z)|F=0\rangle\right|^2}{E_{F=0}-E_{F=1}}$$

作为近似有

$$E^{(2)}(H)=\frac{\mu_B^2H^2}{1400}$$

所以

$$\alpha(H)=\frac{\alpha\mu_B^2}{1400}=\frac{\alpha\times(0.6\times10^{-18}\mathrm{eV/Gs})^2}{58\times10^{-6}\mathrm{eV}}=1.2\times10^{-11}\mathrm{eV/Gs^2}$$

(2) 对氦基态 $(1s)^2$，有 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{S}=\boldsymbol{J}=0$，这样对 $\alpha(H)$ 有贡献的 Hamilton 项为

$$\frac{e^2\boldsymbol{A}^2}{2mc^2}$$

式中，$\boldsymbol{A}=\frac{1}{2}\boldsymbol{H}\times\boldsymbol{r}$.

对基态的两个电子，有

$$E(H)=\left\langle\psi_0\left|\frac{e^2A^2}{2mc^2}\cdot2\right|\psi_0\right\rangle=\frac{2e^2}{2mc^2}\cdot\frac{\boldsymbol{H}^2}{4}\langle\psi_0|(x^2+y^2)|\psi_0\rangle$$

$$=\frac{e^2\boldsymbol{H}^2}{4mc^2}\cdot\frac{2}{3}\cdot\frac{\hbar^4}{m^2e^4}=\frac{e^2\hbar^2}{6m^2c^2}\cdot\frac{\hbar^2}{mc^4}\boldsymbol{H}^2$$

所以

$$\alpha(H)\approx\frac{-e^2\hbar^2}{3m^2c^2}\cdot\frac{\hbar^2}{me^4}=-\frac{4\hbar^2}{3me^4}\cdot\left(\frac{e\hbar}{2mc}\right)^2\approx-\frac{2\times(0.6\times10^{-18}\mathrm{eV/Gs})^2}{3\times13\mathrm{eV}}\approx-1.8\times10^{-18}\mathrm{eV\cdot Gs^{-2}}$$

6.78　八个全同粒子放入谐振子势中的基态能量和再加磁场后的基态能量改变

题 6.78　已知 Hamilton 量为

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}kr^2$$

(1) 求基态和前三个激发态的能量和轨道角动量. (2) 如果 8 个全同的自旋为 $\frac{1}{2}$ 的非相对论粒子放入这样的简谐势中，求 8 粒子系统的基态能量. (3) 假定这些粒子具有磁矩值为 μ，如果外加一磁场 B，8 粒子系统的基态能量作为 B 的函数，其近似表达式为何种形式? 写出磁化强度 $\left(-\frac{\partial E}{\partial B}\right)$.

解 (1) 三维谐振子，其能级公式为

$$E_N = \left(N + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega, \qquad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$N = 2n_r + l, \quad N = 0,1,2\cdots, \quad n_r = 0,1,2,\cdots$$

$$l = N - 2n_r$$

基态

$$E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega, \qquad L = 0$$

第一激发态

$$E_1 = \frac{5}{2}\hbar\omega, \qquad L = \hbar$$

式中，第一激发态含三个简并态.

(2) 8 个粒子填充，考虑到能级的简并性质及粒子的自旋，有 2 个粒子填充到基态，6 个粒子填充到 $N=1$ 的三个激发态，故 8 粒子系统的基态能量为

$$E_0 = 18\hbar\omega$$

(3) 此时系统的 Hamilton 量为

$$H = \sum_{i=1}^{8}\left(\frac{\boldsymbol{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2}kr_i^2\right) - \sum_{i=1}^{8}\boldsymbol{\mu}_i \cdot \mathrm{B} - \sum_{i=1}^{8}\frac{e}{2me}\boldsymbol{L}_i \cdot \boldsymbol{B}$$

$$+ \sum_{i=1}^{8}\frac{e^2}{2mc^2}\mathrm{A}_{(r_i)}^2 + \sum_{i=1}^{8}\frac{1}{2m^2c^2r_i^2}\frac{\mathrm{d}V(r_i)}{\mathrm{d}r_i}\boldsymbol{L}_i \cdot \boldsymbol{S}_i$$

式中，$V(r_i) = \frac{1}{2}kr_i^2$，$\boldsymbol{A}$ 为矢势.

现有 8 个粒子，分居两个壳层，为满壳层，故 $S=0, L=0, j=0$. 它的波函数为下列函数的乘积(未包括径向部分)

$$\begin{cases} Y_{00}(e_1)Y_{00}(e_2)\dfrac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)] \\ Y_{11}(e_3)Y_{11}(e_4)\dfrac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(3)\beta(4) - \alpha(4)\beta(3)] \\ Y_{10}(e_5)Y_{10}(e_6)\dfrac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(5)\beta(6) - \alpha(6)\beta(5)] \\ Y_{1-1}(e_7)Y_{1-1}(e_8)\dfrac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(7)\beta(8) - \alpha(8)\beta(7)] \end{cases}$$

式中，$e_i=\dfrac{r_i}{r_i}$.

原因是每一组内两子空间波函数相同，总空间波函数为对称的，于是总自旋波函数为反对称的，为自旋单态. 由于

$$\sigma_{1x}\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)-\alpha(2)\beta(1)]=\frac{1}{\sqrt{2}}[\beta(1)\beta(2)-\alpha(2)\alpha(1)]$$

$$\sigma_{2x}\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)-\alpha(2)\beta(1)]=-\frac{1}{\sqrt{2}}[\beta(1)\beta(2)-\alpha(2)\alpha(1)]$$

$$\sigma_{1y}\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)-\alpha(2)\beta(1)]=\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}[\beta(1)\beta(2)+\alpha(2)\alpha(1)]$$

$$\sigma_{2y}\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)-\alpha(2)\beta(1)]=-\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}[\beta(1)\beta(2)+\alpha(2)\alpha(1)]$$

$$\sigma_{1z}\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)-\alpha(2)\beta(1)]=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)+\alpha(2)\beta(1)]$$

$$\sigma_{2z}\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)-\alpha(2)\beta(1)]=-\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)+\alpha(2)\beta(1)]$$

和左矢 $\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)-\alpha(2)\beta(1)]^\dagger$ 内积时，不论 Y 如何，$\langle\sigma_{1x}\rangle,\langle\sigma_{2x}\rangle,\langle\sigma_{1y}\rangle,\langle\sigma_{2y}\rangle$ 为 0，而

$$\langle\sigma_{1z}+\sigma_{2z}\rangle=0$$

得

$$\begin{aligned}\langle\sigma_{1x}L_{1x}+\sigma_{2x}L_{2x}\rangle&=-\mathrm{i}\hbar\left\langle\frac{\partial}{\partial\varphi_1}\cdot\sigma_{1x}+\frac{\partial}{\partial\varphi_2}\cdot\sigma_{2x}\right\rangle\\&=-\mathrm{i}\hbar\left[\left\langle\frac{\partial}{\partial\varphi_1}\right\rangle\langle\sigma_{1x}\rangle+\left\langle\frac{\partial}{\partial\varphi_2}\right\rangle\langle\sigma_{2x}\rangle\right]\\&=-\mathrm{i}\hbar\left\langle\frac{\partial}{\partial\varphi}\right\rangle\langle\sigma_{1x}+\sigma_{2x}\rangle=0\end{aligned}$$

于是基态能量(注意到 $\sum\boldsymbol{\mu}_i=0$)

$$E=18\hbar\omega+\frac{e^2}{8mc^2}\sum_{i=1}^{8}\left\langle(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r}_i)^2\right\rangle=18\hbar\omega+\frac{e^2B^2}{8me^2}\sum_{i=1}^{8}\left\langle r_i^2\sin^2\theta\right\rangle$$

从而磁化强度

$$-\frac{\partial E}{\partial B}=\frac{-e^2B}{4mc^2}\sum_{i=1}^{8}\left\langle r_i^2\sin^2\theta\right\rangle=\chi B$$

式中，$\chi=-\dfrac{e^2}{2mc^2}\displaystyle\sum_{i=1}^{8}\left\langle r_i^2\sin^2\theta\right\rangle$ 正是抗磁性磁化率.

6.79　氢原子中 s 态电子在强 H_z 与弱 H_x 作用下自旋态的变化

题 6.79　考虑处于强度为 H_z，方向沿 z 轴的磁场中的氢原子的 s 态电子(假定核无自旋). 在时间 $t=0$ 时，加上一个沿 x 轴方向的磁场，它的强度均匀地由零增加到 T 时刻的 H_x，

并且在$t=T$以后保持为常数($H_x \ll H_z$). 只计及电子自旋与磁场的相互作用，忽略$\left(\frac{H_x}{H_z}\right)^2$及更高阶的项. 如果电子自旋在$t=0$时沿$z$方向，计算出$t=T$时电子的状态，证明这个态在$T$充分长时是联合磁场$\boldsymbol{H}=(H_x,0,H_z)$所对应的 Hamilton 量的本征态. 请解释在这里的充分长的含义.

解 可以用含时微扰论处理这个问题，设波函数为

$$\psi(t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_+t/\hbar}\left|\frac{1}{2}\right\rangle+a_-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_-t/\hbar}\left|-\frac{1}{2}\right\rangle$$

则a_-可由下式算出

$$\begin{aligned}a_-&=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^T\mathrm{d}t\left\langle-\frac{1}{2}\right|H'\left|\frac{1}{2}\right\rangle\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_+-E_-)t/\hbar}\\&=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^T\mathrm{d}t\left\langle-\frac{1}{2}\right|\frac{e}{mc}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{H}\left|\frac{1}{2}\right\rangle\exp\left(-\mathrm{i}\frac{eH_z}{mc}t\right)\\&=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^T\mathrm{d}t\frac{eH_x}{mc}\frac{t}{T}\left\langle-\frac{1}{2}\right|S_x\left|\frac{1}{2}\right\rangle\exp\left(-\mathrm{i}\frac{eH_z}{mc}t\right)\\&=\frac{eH_x}{2\mathrm{i}mcT}\int_0^T t\exp\left(-\mathrm{i}\frac{eH_z}{mc}t\right)\mathrm{d}t\\&=\frac{1}{2}\left(\frac{H_x}{H_z}\right)\exp\left(-\mathrm{i}\frac{eH_z}{mc}T\right)-\frac{\mathrm{i}mcH_x}{2eTH_z^2}\left[\exp\left(-\mathrm{i}\frac{eH_z}{mc}T\right)-1\right]\end{aligned}$$

于是，T时刻电子的自旋态为

$$\begin{aligned}\psi(T)=\exp\left(-\mathrm{i}\frac{eH_z}{2mc}T\right)\left|\frac{1}{2}\right\rangle&+\left\{\frac{1}{2}\left(\frac{H_x}{H_z}\right)\exp\left(-\mathrm{i}\frac{eH_z}{mc}T\right)\right.\\&\left.-\frac{\mathrm{i}mcH_x}{2eTH_z^2}\left[\exp\left(-\mathrm{i}\frac{eH_z}{mc}T\right)-1\right]\right\}\exp\left(-\mathrm{i}\frac{eH_z}{2mc}T\right)\left|-\frac{1}{2}\right\rangle\end{aligned}$$

当T充分长，使得

$$\frac{mc}{eT}\leqslant H_x$$

时，我们得出$\psi(T)$为(略去了a_-中的第二项)

$$\psi(T)=\exp\left(-\mathrm{i}\frac{eH_z}{2mc}T\right)\left(\left|\frac{1}{2}\right\rangle+\frac{1}{2}\frac{H_x}{H_z}\left|-\frac{1}{2}\right\rangle\right)$$

将 Hamilton 量

$$H=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}=\frac{eH_z}{mc}S_z+\frac{eH_x}{mc}S_x$$

作用在$\psi(T)$上，则可得出

$$H\psi(T)=\frac{e\hbar H_z}{2mc}\exp\left(-\mathrm{i}\frac{eH_z}{2mc}T\right)\left\{\left[1+\frac{1}{2}\left(\frac{H_x}{H_z}\right)^2\right]\left|\frac{1}{2}\right\rangle+\frac{1}{2}\left(\frac{H_x}{H_z}\right)\left|-\frac{1}{2}\right\rangle\right\}$$

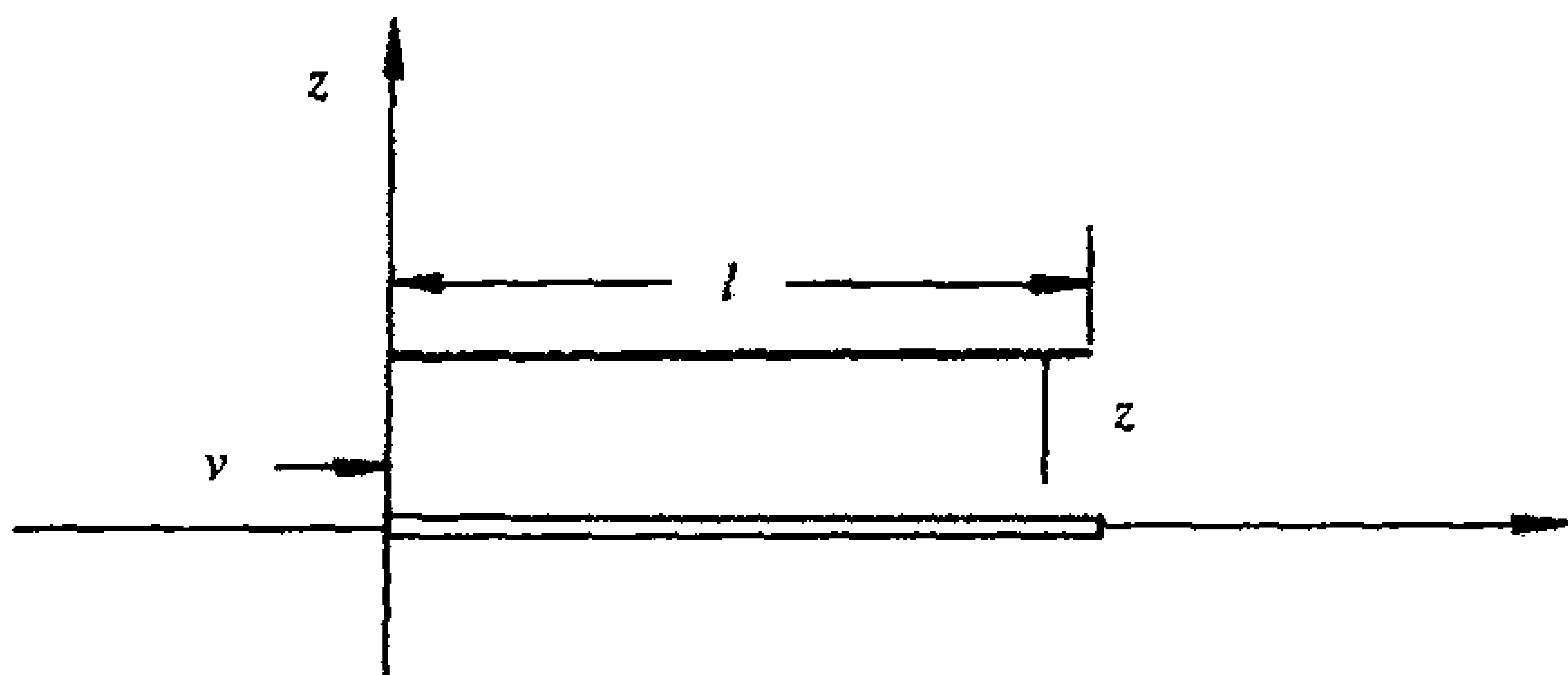
$$=\frac{e\hbar H_z}{2mc}\exp\left(-\mathrm{i}\frac{eH_z}{2mc}T\right)\left(\left|\frac{1}{2}\right\rangle+\frac{1}{2}\frac{H_x}{H_z}\left|-\frac{1}{2}\right\rangle\right)$$

$$=\frac{e\hbar H_z}{2mc}\psi(T)$$

可见$\psi(T)$为与联合磁场$\boldsymbol{H}=(H_x,0,H_z)$相应的 Hamilton 量的本征态.

6.80　2s 态氢原子通过带电电容器后处于不同$n=2$态的概率

题 6.80　一个长为l的电容器的平板之间存在均匀电场$\boldsymbol{E}$，如题图 6.80 所示一束处于 2s 激发态的氢原子以速度v平行通过极板间. 没有电场时$n=2$的各态简并，但加上电场时某些简并消除. (1) 哪些态由一级微扰论联系起来？(2) 找出尽可能消除简并的$n=2$态的线性的组合. (3) $t=0$时，粒子束处于 2s 态，找出$t\leqslant\frac{l}{v}$时的状态. (4) 找出出射态中氢原子处于各不同$n=2$态的概率.



题图 6.80

解　氢原子在外电场中的微扰 Hamilton 量为

$$\Delta V=eEz$$

其矩阵元除$\langle 210|\Delta V|200\rangle=-3eEa$外皆为 0.

(1) 2s 态和 2p 态由这个微扰联系起来了. (一级微扰论情形)

(2) Hamilton 量$\Delta V=\begin{pmatrix}0 & -3eEa\\ -3eEa & 0\end{pmatrix}$，其本征值是$\pm 3eEa$，相应的本征矢是$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ \pm 1\end{pmatrix}$.

(3) $t=0$时，

$$\psi(0)=\frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle+|-\rangle)$$

式中

$$|+\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ 1\end{pmatrix},\qquad |-\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -1\end{pmatrix}$$

时间t后

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{-i3eEat/\hbar}|+\rangle + e^{i3eEat/\hbar}|-\rangle\right)$$
$$= \begin{pmatrix} \cos(3eEat/\hbar) \\ \sin(3eEat/\hbar) \end{pmatrix} = \cos\frac{3eEat}{\hbar}|2s\rangle + \sin\frac{3eEat}{\hbar}|2p\rangle$$
$$= \cos\frac{3eEat}{\hbar}|2s\rangle + \sin\frac{3eEat}{\hbar}|2p\rangle$$

(4) 由(3)知，在 $t > \frac{l}{v}$ 时

$$|\langle 200|\psi(t)\rangle|^2 = \cos^2\frac{3eEat}{\hbar}$$
$$|\langle 210|\psi(t)\rangle|^2 = \sin^2\frac{3eEat}{\hbar}$$

6.81 两个相对运动惯性系的 Schrödinger 方程及基态的变化

题 6.81 (1) 考虑一质量为 m 的粒子，在含时一维势 $V(x,t)$ 中运动. 在以速度 v 相对运动的两个参考系 (x,t) 和 (x',t)（这里 $x = x' + vt$）中分别写出相应的 Schrödinger 方程. (2) 想像一粒子处于 $\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ 的一维势阱中(题图 6.81(a)). $t=0$ 时刻阱突然受一冲击并开始以速度 v 向右运动(题图 6.81(b)). 就是说，假定 $V(x,t)$ 具有以下形式

$$V(x,t) = \begin{cases} \frac{1}{2}m\omega^2x^2, & t<0 \\ \frac{1}{2}m\omega^2x'^2, & t>0 \end{cases}$$

若 $t<0$ 时粒子处于 (x,t) 坐标系中的基态，在 $t>0$ 时粒子处于 (x',t) 坐标系中的基态的概率是多少？



题图 6.81

解 (1) 它们都是惯性系.

(x,t) 系：
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2}{dx^2} + V(x,t)\right]\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)$$

(x',t) 系：
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2}{dx^2} + V'(x',t)\right]\psi(x',t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x',t)$$

式中

$$V'(x',t)=V'(x-vt,t)=V(x,t)$$

(2) 本题和题 8.33 是相同的，可利用题 8.33 的计算结果. 这是因为在本题中，势阱突然向右匀速运动(注意，题中只说势阱受一冲击向右运动，未涉及粒子)，求在 V 的随动系(V 在其中是相对静止的) x' 系中粒子处于基态的概率. 这题如站在 x' 系中观察，也可等价地表述为：粒子在 $t=0$ 时刻受到一冲击而向左匀速运动(V 则一直静止)，求在 V 为静止的坐标系中粒子处于基态的概率.

在题 8.33 中，粒子(^{27}Al 核)由于向右发射一 γ 光子而受到反冲，向左匀速运动(振子势则未动)，求在实验室系(振子势在其中静止，相当于本题的 x' 系)中 ^{27}Al 核仍处于基态的概率.

显然两题本质上是相同的.

6.82　一维浅势阱中的能级

题 6.82　试求一维浅势阱 U 中的能级，假定势阱 U 满足 $|U|\ll\hbar^2/ma^2\ (ka\ll 1)$，$a$ 为势阱宽度，并且积分 $\int_{-\infty}^{\infty}U\mathrm{d}x$ 收敛.

解　在本题势满足的条件下，整个势能可以作为微扰来处理，此时未受微扰 Schrödinger 方程即粒子的自由运动方程

$$\Delta\psi^{(0)}+k^2\psi^{(0)}=0,\qquad k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}=\frac{p}{\hbar}$$

式中，$\psi^{(0)}$ 为平面波解. 一级近似波函数 $\psi^{(1)}$ 满足下列方程

$$\Delta\psi^{(1)}+k^2\psi^{(1)}=\frac{2mU}{\hbar^2}\psi^{(0)}$$

式中，U 为势函数.

由电动力学可以知道，上式的解可写成推迟势形式

$$\psi^{(1)}(x,y,z)=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int\psi^{(0)}U(x',y',z')\mathrm{e}^{ikr}\frac{\mathrm{d}V'}{r}$$

式中，$r^2=(x-x')^2+(y-y')^2+(z-z')^2$.

现在我们来算能级，先假定能级 $|E|\ll|U|$，此假定将被结果证明是合理的，在此假定下，Schrödinger 方程的右边

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}=\frac{2m}{\hbar^2}[U(x)-E]\psi$$

可以略去势阱范围内的 E，而 $\psi\sim\psi^{(0)}$，当 E 很小时 $\psi^{(0)}$ 可看作常数，不失其普遍性，可令 $\psi\sim\psi^{(0)}=1$，则有

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}=\frac{2m}{\hbar^2}U\tag{1}$$

式(1)对 $\mathrm{d}x$ 积分，积分限为 $\pm x_1$，并且 $a\ll x_1\ll 1/k$，其中 $k=\dfrac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}$. 由于 $U(x)$ 的积分收

敛，右边积分可延伸从$-\infty$到∞

$$\left.\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right|_{-x_1}^{x_1}=\frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty}U\mathrm{d}x \tag{2}$$

在远离势阱处，波函数呈$\psi=\mathrm{e}^{\pm kx}$形式，把它代入式(2)，可得

$$-2k=\frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty}U\mathrm{d}x$$

即

$$|E|=\frac{m}{2\hbar^2}\left(\int_{-\infty}^{\infty}U\mathrm{d}x\right)^2$$

由此可见，能级是一个很小的量，是微扰阱深的高阶小量(二阶小量)，与假设相符.

6.83 二维浅势阱中的能级

题 6.83 求二维浅势阱$U=U(r)$中的能级(r为平面中的极坐标)；假定积分$\int_0^{\infty}rU\mathrm{d}r$是收敛的.

解 和题 6.82 类似，忽略阱内的粒子能量，并假设 Schrödinger 方程右边的$\psi=1$，有

$$\frac{1}{r}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}r}\right)=\frac{2m}{\hbar^2}U(r) \tag{1}$$

式(1)对r从 0 到r_1积分(其中$a\ll r_1\ll 1/k$)，结果得

$$\left.\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}r}\right|_{r=r_1}=\frac{2m}{\hbar^2 r_1}\int_0^{\infty}rU(r)\mathrm{d}r \tag{2}$$

在远离势阱处，两维自由运动的方程为

$$\frac{1}{r}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}r}\right)+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi=0$$

它有($r\sim\infty$时$\psi\sim 0$)的解$\psi=\mathrm{const}\times H_0^{(1)}(\mathrm{i}kr)$；当$k$很小时，$H_0^{(1)}$中的首项正比于$\lg kr$，因此，当我们在$r\sim a$处，把阱内外的$\psi$的对数导数等同起来，利用式(2)就得到

$$\frac{1}{a\lg ka}\approx\frac{2m}{\hbar^2 a}\int_0^{\infty}U(r)r\mathrm{d}r \tag{3}$$

由式(3)得到

$$|E|\sim\frac{\hbar^2}{ma^2}\exp\left(-\frac{\hbar^2}{m}\left|\int_0^{\infty}Ur\mathrm{d}r\right|^{-1}\right) \tag{4}$$

由式(4)看到，能级比势阱深(指数式地)小很多.

6.84 用变分法求双原子分子的零级近似波函数

题 6.84 用变分法求双原子分子的零级近似波函数.

解 设一电子在双原子分子的平均场中运动，受到的 Hamilton 量为

$$H=\frac{p^2}{2m}+V_1+V_2=H_1+V_2=H_2+V_1 \tag{1}$$

式中

$$H_1=\frac{p^2}{2m}+V_1,\qquad H_2=\frac{p^2}{2m}+V_2$$

H_1,H_2 分别是电子在原子 1，2 单独作用下的 Hamilton 量，其中 V_1,V_2 分别表示原子 1，2 对电子的平均场. 为用变分法求基态波函数，设试探波函数为

$$\psi(\boldsymbol{r})=a_1\psi_1(\boldsymbol{r})+a_2\psi_2(\boldsymbol{r})$$

式中，$\psi_1(\boldsymbol{r})$ 和 $\psi_2(\boldsymbol{r})$ 分别为单电子在原子 1 和原子 2 中原子轨道波函数，a_1,a_2 为待定复参数.

由归一化条件可得

$$1=\int\psi^*\psi\mathrm{d}V=\sum_{ij=1}^{2}a_i^*\Delta_{ij}a_j,\qquad \Delta_{ij}=\int\psi_i^*\psi_j\mathrm{d}V\quad(i,j=1,2) \tag{2}$$

由于 ψ_i 是归一化的，故 $\Delta_{ij}=1$. 平均能量为

$$\langle E\rangle=\langle\psi|H|\psi\rangle=\sum_{ij=1}^{2}a_i^*H_{ij}a_j,\qquad H_{ij}=\int\psi_i^*H\psi_i\mathrm{d}V$$

根据变分法，引进 Lagrange 乘子 ε，在归一化条件式(2)成立条件下，取 $\langle E\rangle$ 对 a_i^* 的变分为零，可得

$$\sum_{j=1}^{2}H_{ij}a_j=\varepsilon\sum_{j=1}^{2}\Delta_{ij}a_j,\qquad j=1,2 \tag{2}$$

ε 的意义从将式(2)乘以 a_i^* 并对 i 求和可知，恰好 $\varepsilon=\langle E\rangle$，即 ε 为 a_1,a_2 满足上述方程时分子中单电子能量.

将 Hamilton 量式(1)代入式(2)，并注意到 $\Delta_{ij}=0$，可得

$$\begin{cases}\left[\varepsilon^0+k(R_{12})-\varepsilon\right]a_1+\left[\varepsilon^0\Delta+J(R_{12})-\varepsilon\Delta\right]a_2=0\\ \left[\varepsilon^0\Delta+J(R_{12})-\varepsilon\Delta\right]a_1+\left[\varepsilon^0+k(R_{12})-\varepsilon\right]a_2=0\end{cases} \tag{3}$$

在推导式(3)时用到了

$$H_{11}\doteq\langle\psi_1|H|\psi_1\rangle=\int\psi_1^*H_1\psi_1\mathrm{d}V+\int\psi_1^*V_2\psi_1\mathrm{d}V=\varepsilon^0+k(R_{12})$$

$$H_{21}=\langle\psi_2|H|\psi_1\rangle=\int\psi_2^*H_1\psi_1\mathrm{d}V+\int\psi_2V_2\psi_1\mathrm{d}V=\varepsilon^0\Delta_{21}+J(R_{12})$$

式中，$k(R_{12})=\int|\psi_1|^2V_2dV$，为一个原子对另一原子中电子的 Coulomb 作用能，$J(R_{12})$ 为交换能，它们都是两原子距离 R_{12} 的函数. ε^0 是电子在一个单独原子中的能量，设两原子是相同的原子，所以有 $H_{22}=H_{11},H_{21}=H_{12},\Delta_{12}=\Delta_{21}=\Delta$.

由式(3)有非零解须系数行列式为零，有

$$\begin{vmatrix}\varepsilon^0+k(R_{12})-\varepsilon, & \varepsilon^0\Delta+J(R_{12})-\varepsilon\Delta\\ \varepsilon^0\Delta+J(R_{12})-\varepsilon\Delta, & \varepsilon^0+k(R_{12})-\varepsilon\end{vmatrix}=0 \tag{4}$$

式(4)有两根为

$$\varepsilon = \varepsilon_{\pm} = \varepsilon^0 + \frac{k(R_{12}) \pm J(R_{12})}{1 \pm \Delta}$$

若忽略上式中的Δ，近似有

$$\varepsilon_{\pm} \approx \varepsilon^0 + k(R_{12}) \pm J(R_{12})$$

将$\varepsilon_{\pm}$代回式(3)，可得两组解

$$\varepsilon = \varepsilon^+ 时，\begin{cases} a_1 = a_2 = \dfrac{1}{\sqrt{2(1+\Delta)}} \\ \psi(\boldsymbol{r}) = \psi_+(\boldsymbol{r}) = \dfrac{\psi_1(\boldsymbol{r}) + \psi_2(\boldsymbol{r})}{\sqrt{2(1+\Delta)}} \end{cases} \tag{5}$$

$$\varepsilon = \varepsilon^- 时，\begin{cases} a_1 = -a_2 = \dfrac{1}{\sqrt{2(1-\Delta)}} \\ \psi(\boldsymbol{r}) = \psi_-(\boldsymbol{r}) = \dfrac{\psi_1(\boldsymbol{r}) - \psi_2(\boldsymbol{r})}{\sqrt{2(1-\Delta)}} \end{cases} \tag{6}$$

式(5)和式(6)即给出两个分子波函数(或称分子轨道)

讨论 由于V_1, V_2都小于0，所以$k(R_{12})<0$, $J(R_{12})<0$. 由于原子仅对靠近的电子作用显著，所以k的数值较小，有$|J|>|K|$. 因此ψ_+的能量比原子轨道低的多称为成键轨道，ψ_-的能量比原子轨道高，称为反键轨道.

6.85 在有磁场或无磁场时，核内“中子振荡”的跃迁问题

题 6.85 如果重子数守恒，那么称为“中子振荡”的跃迁

$$\mathrm{n} \leftrightarrow \bar{\mathrm{n}}$$

是禁戒的. 实验上，对于在没有磁场的自由空间中这种振荡在时间标度上的实验限制为

$$\tau_{\mathrm{n}\leftrightarrow\bar{\mathrm{n}}} \geqslant 3\times 10^6 \mathrm{s}$$

由于稳定核内中子含量丰富，人们容易天真地认为有可能得到一个好得多的限制. 本题的目的是了解为什么这种限制如此不好.

设H_0是在设有能将n和$\bar{\mathrm{n}}$混合的相互作用的世界中的Hamilton量. 则对于静止态

$$H_0|\mathrm{n}\rangle = m_\mathrm{n}c^2|\mathrm{n}\rangle, \qquad H_0|\bar{\mathrm{n}}\rangle = m_\mathrm{n}c^2|\bar{\mathrm{n}}\rangle$$

设H'是将n变成$\bar{\mathrm{n}}$或者相反的相互作用

$$H'|\mathrm{n}\rangle = \varepsilon|\bar{\mathrm{n}}\rangle, \qquad H'|\bar{\mathrm{n}}\rangle = \varepsilon|\mathrm{n}\rangle$$

ε是实数，并且H'不改变自旋.

(1) $t=0$时从中子开始讨论，计算在时刻t观测到该中子变成一个反中子的概率. 当这个概率第一次等于 50%时所经历的时间称为$\tau_{\mathrm{n}\leftrightarrow\bar{\mathrm{n}}}$. 用这个方法将对$\tau_{\mathrm{n}\leftrightarrow\bar{\mathrm{n}}}$的实验限制转化成对$\varepsilon$的限制. 注意$m_\mathrm{n}c^2 = 940\mathrm{MeV}$. (2) 在计入地球磁场$\left(B_0 \approx \dfrac{1}{2}\mathrm{Gs}\right)$时重新考虑这一问题. 中子磁矩为$\mu_\mathrm{n} \approx -6\times10^{-18}\mathrm{MeV/Gs}$. 反中子磁矩符号相反. $t=0$时从中子开始讨论，计算在时刻t观测到该中子变成一个反中子的概率. (提示：计算到小量的最低阶)忽略可能的辐射

跃迁. (3) 具有自旋的核带有非零磁场. 根据(2)，简单定性地解释处于这种核内的中子何以能如此稳定，而 $\tau_{\mathrm{n}\leftrightarrow\bar{\mathrm{n}}}$ 仅受到限制 $\tau_{\mathrm{n}\leftrightarrow\bar{\mathrm{n}}} \geqslant 3\times10^6\mathrm{s}$. (4) 具有零自旋的核其平均磁场为零. 简单地解释在这种核内为什么中子振荡仍然是被抑制的.

解　(1) 先求 $H = H_0 + H'$ 的本征态. 为此，引进矩阵记号(中子-反中子表象)

$$|\mathrm{n}\rangle \sim \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |\bar{\mathrm{n}}\rangle \sim \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

则能量本征值方程为

$$\begin{pmatrix} m_{\mathrm{n}}c - E & \varepsilon \\ \varepsilon & m_{\mathrm{n}}c^2 - E \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0$$

解之，得

$$E_+ = m_{\mathrm{n}}c^2 + \varepsilon, \qquad \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$E_- = m_{\mathrm{n}}c^2 - \varepsilon, \qquad \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$t=0$ 时体系处于中子态

$$|\mathrm{n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|E_+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|E_-\rangle$$

式中

$$|E_+\rangle \sim \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad |E_-\rangle \sim \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

而在任意时刻 t ，体系状态将变为

$$|\psi,t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_+t/\hbar}|E_+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_-t/\hbar}|E_-\rangle$$

上式在中子-反中子表象中给出

$$|\psi,t\rangle \sim \mathrm{e}^{-\mathrm{i}m_{\mathrm{n}}c^2\frac{t}{\hbar}}\begin{pmatrix} \cos\dfrac{\varepsilon t}{\hbar} \\ -\mathrm{i}\sin\dfrac{\varepsilon t}{\hbar} \end{pmatrix}$$

所以

$$|\psi,t\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}m_{\mathrm{n}}c^2t/\hbar}\cos\frac{\varepsilon t}{\hbar}|\mathrm{n}\rangle - \mathrm{i}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m_{\mathrm{n}}c^2t/\hbar}\sin\frac{\varepsilon t}{\hbar}|\bar{\mathrm{n}}\rangle$$

所求概率为

$$P(t) = \sin^2\frac{\varepsilon t}{\hbar}$$

由定义求出

$$\tau_{\mathrm{n}\leftrightarrow\bar{\mathrm{n}}} = \frac{\pi\hbar}{4\varepsilon}$$

实验对 ε 的限制为

$$\varepsilon \leqslant 1.65\times10^{-28}\mathrm{MeV}$$

(2) 注意到H'不改变自旋，在加进磁场后，可取如下的中子-反中子表象

$$\mathrm{n}\uparrow\sim\begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix},\quad \bar{\mathrm{n}}\uparrow\sim\begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix},\quad \mathrm{n}\downarrow\sim\begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix},\quad \bar{\mathrm{n}}\downarrow\sim\begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix}$$

于是，微扰 Hamilton 量的矩阵元为

$$\begin{pmatrix}-\mu_{\mathrm{n}}B_0 & \varepsilon & 0 & 0\\ \varepsilon & -\mu_{\bar{\mathrm{n}}}B_0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & \mu_{\mathrm{n}}B_0 & \varepsilon\\ 0 & 0 & \varepsilon & \mu_{\bar{\mathrm{n}}}B_0\end{pmatrix}$$

式中

$$\mu_{\mathrm{n}}\approx-6\times10^{-18}\mathrm{MeV/Gs},\qquad \mu_{\bar{\mathrm{n}}}\approx6\times10^{-18}\mathrm{MeV/Gs}$$

容易看出本征方程可分为两个(已将$\mu_{\bar{\mathrm{n}}}$换为$-\mu_{\mathrm{n}}$)

$$\begin{pmatrix}-\mu_{\mathrm{n}}B_0-E^{(1)} & \varepsilon\\ \varepsilon & \mu_{\mathrm{n}}B_0-E^{(1)}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}b\uparrow\\ a\uparrow\end{pmatrix}=0$$

$$\begin{pmatrix}\mu_{\mathrm{n}}B_0-E^{(1)} & \varepsilon\\ \varepsilon & -\mu_{\mathrm{n}}B_0-E^{(1)}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\downarrow\\ b\downarrow\end{pmatrix}=0$$

解之，得

$$E_{\pm}^{(1)}=\pm\lambda=\pm\sqrt{\varepsilon^2+(\mu_{\mathrm{n}}B_0)^2}$$

$$\begin{pmatrix}a\uparrow\\ b\uparrow\end{pmatrix}_+=\frac{1}{\sqrt{2\lambda}}\begin{pmatrix}\sqrt{\lambda-\mu_{\mathrm{n}}B_0}\\ \sqrt{\lambda+\mu_{\mathrm{n}}B_0}\end{pmatrix},\qquad \begin{pmatrix}a\uparrow\\ b\uparrow\end{pmatrix}_-=\frac{1}{\sqrt{2\lambda}}\begin{pmatrix}\sqrt{\lambda+\mu_{\mathrm{n}}B_0}\\ -\sqrt{\lambda-\mu_{\mathrm{n}}B_0}\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}a\downarrow\\ b\downarrow\end{pmatrix}_+=\frac{1}{\sqrt{2\lambda}}\begin{pmatrix}\sqrt{\lambda+\mu_{\mathrm{n}}B_0}\\ \sqrt{\lambda-\mu_{\mathrm{n}}B_0}\end{pmatrix},\qquad \begin{pmatrix}a\downarrow\\ b\downarrow\end{pmatrix}_-=\frac{1}{\sqrt{2\lambda}}\begin{pmatrix}\sqrt{\lambda-\mu_{\mathrm{n}}B_0}\\ -\sqrt{\lambda+\mu_{\mathrm{n}}B_0}\end{pmatrix}$$

$t=0$时体系处于中子态

$$\mathrm{n}\uparrow\sim\sqrt{\frac{\lambda-\mu_{\mathrm{n}}B_0}{2\lambda}}\begin{pmatrix}a\uparrow\\ b\uparrow\end{pmatrix}_++\sqrt{\frac{\lambda+\mu_{\mathrm{n}}B_0}{2\lambda}}\begin{pmatrix}a\uparrow\\ b\uparrow\end{pmatrix}_-$$

$$\mathrm{n}\downarrow\sim\sqrt{\frac{\lambda+\mu_{\mathrm{n}}B_0}{2\lambda}}\begin{pmatrix}a\downarrow\\ b\downarrow\end{pmatrix}_++\sqrt{\frac{\lambda-\mu_{\mathrm{n}}B_0}{2\lambda}}\begin{pmatrix}a\downarrow\\ b\downarrow\end{pmatrix}_-$$

在任意时刻t的状态为

$$(\uparrow)\sim\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m_{\mathrm{n}}ct/\hbar}\frac{1}{2\lambda}\begin{pmatrix}(\lambda-\mu_{\mathrm{n}}B_0)e^{-\mathrm{i}\lambda t/\hbar}+(\lambda+\mu_{\mathrm{n}}B_0)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda t/\hbar}\\ \sqrt{\lambda^2-(\mu_{\mathrm{n}}B_0)^2}(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda t/\hbar}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda t/\hbar})\end{pmatrix}$$

$$(\downarrow)\sim\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m_{\mathrm{n}}ct/\hbar}\frac{1}{2\lambda}\begin{pmatrix}(\lambda+\mu_{\mathrm{n}}B_0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda t/\hbar}+(\lambda-\mu_{\mathrm{n}}B_0)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda t/\hbar}\\ \sqrt{\lambda^2-(\mu_{\mathrm{n}}B_0)^2}(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda t/\hbar}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda t/\hbar})\end{pmatrix}$$

所以，$\mathrm{n}\uparrow\to\bar{\mathrm{n}}\uparrow$的概率为

$$P_{n\uparrow\to\bar{n}\uparrow}(t)=\frac{\varepsilon^2}{\lambda^2}\sin^2\frac{\lambda t}{\hbar}$$
$$=\frac{\varepsilon^2}{\varepsilon^2+(\mu_n B_0)^2}\sin^2\frac{\sqrt{\varepsilon^2+(\mu_n B_0)^2}t}{\hbar}$$

而 $n\downarrow\to\bar{n}\downarrow$ 的概率为

$$P_{n\downarrow\to\bar{n}\downarrow}(t)=\frac{\varepsilon^2}{\lambda^2}\sin^2\frac{\lambda t}{\hbar}$$
$$=\frac{\varepsilon^2}{\varepsilon^2+(\mu_n B_0)^2}\sin^2\frac{\sqrt{\varepsilon^2+(\mu_n B_0)^2}t}{\hbar}$$

最后，若中子为非极化的，则 $n\to\bar{n}$ 的概率为

$$P(t)=\frac{1}{2}P_{n\uparrow\to\bar{n}\uparrow}(t)+\frac{1}{2}P_{n\downarrow\to\bar{n}\downarrow}(t)$$
$$=\frac{\varepsilon^2}{\varepsilon^2+(\mu_n B_0)^2}\sin^2\frac{\sqrt{\varepsilon^2+(\mu_n B_0)^2}t}{\hbar}$$

即极化与否对概率无影响.

由题所给数据可知 $\mu_n B_0\gg\varepsilon$，

$$P(t)\leqslant\left(\frac{1.65\times10^{-28}}{6\times10^{-18}\times1/2}\right)^2\approx0.3\times10^{-20}$$

可以看出，转化概率非常小.

(3) 自旋不为 0，核内部磁场很强，远大于 1/2Gs，从(2)中结果可知 $P_{n\to\bar{n}}\ll10^{-20}$ 转化概率很小，所以可以认为中子是稳定的.

(4) 自旋为 0，平均磁场为 0，一般说来，这只是对核外部的磁场而言，核内部的磁场不一定为 0，并且 B 还很大，因此转化概率 $P_{n\to\bar{n}}$ 很小. 退一步说，即使核内部磁场在长时间内平均为 0，中子在每个瞬时感受到的磁场不一定为 0. 从(2)的结果来看，只要存在磁场，$P_{n\to\bar{n}}$ 就要变得很小. 总之，自旋为 0 的核，核内的中子振荡也是被抑制的.

6.86 用变分法证明一维吸引势场中至少有一个束缚态

题 6.86 可以证明在一维方势阱中至少有一个束缚态. 用这一事实再用变分原理证明任何形状的一维吸引势场中至少有一个束缚态.

解 设任意形状的势为 V，一维方势阱的势表示为 V_s，则两种势的 Hamilton 量分别为

$$H=T+V \quad 和 \quad H_s=T+V_s$$

式中，T 为动能算符.

设 ψ_s 为 H_s 的能量为 E_s 的本征态，则显然有

$$\int\psi_s^*(T+V_s)\psi_s\mathrm{d}x=E_s \tag{1}$$

这里 E_s 小于 0.

设 E_0 是势 V 的基态能量，由变分原理可知，任何波函数的 Hamilton 期望值大于 E_0. 所

以有

$$\int \psi_s^*(T+V)\psi_s \mathrm{d}x \geqslant E_0 \tag{2}$$

由式(1)、式(2)可知

$$\int \psi_s^*(V-V_s)\psi_s \mathrm{d}x \geqslant E_0 - E_s \tag{3}$$

因为无论方势阱多浅总有一个束缚态ψ_s，且V是负函数，所以我们总可以使$V-V_s$对所有x值小于0，在这种情况下，$\int |\psi_s|^2 (V-V_s)\mathrm{d}x$是负值，再由式(3)可得

$$E_0 - E_s \leqslant 0$$

因为E_s是负值，故E_0也是负值，即对于V至少有一个束缚态，它的能量为E_0.

6.87 正交晶格离子在微扰势$V(r)=Ax^2+By^2-(A+B)z^2$作用下的能量一阶修正及本征态

题 6.87 正交晶格上一个$^2p_{3/2}$离子附近的静电势可写为

$$V(r)=Ax^2+By^2-(A+B)z^2$$

其中A,B为常数. 设对于自由离子的一组波函数是

$$\psi_1=R(r)Y_{11},\qquad \psi_0=R(r)Y_{10},\qquad \psi_{-1}=R(r)Y_{1-1}$$

这里$R(r)$是离子径向波函数，Y_{11},Y_{10},Y_{1-1}是球谐函数.

(1) 证明，以$\psi_{11},\psi_{10},\psi_{1-1}$为基的$V(r)$的矩阵为

$$r\begin{pmatrix} A+B & 0 & -A+B \\ 0 & -2(A+B) & 0 \\ -A+B & 0 & A+B \end{pmatrix}$$

这里r为常数.

(2) $V(r)$以$M_J=3/2,1/2,-1/2,-3/2$为基的矩阵为

$$\begin{pmatrix} a & 0 & b & 0 \\ 0 & -a & 0 & b \\ b & 0 & -a & 0 \\ 0 & b & 0 & a \end{pmatrix}$$

式中

$$a=r(A+B),\qquad b=r(B-A)/\sqrt{3}$$

(3) 假设$V(r)$很小，证明基态的一阶能量修正是$\pm\sqrt{a^2+b^2}$，每一个值都是两度简并的. 若相对正能量修正值的本征态之一是$\cos\theta|3/2\rangle+\sin(\theta/2)|-1/2\rangle$，这里$\theta=\arctan(b/a)$，求另一个本征态.

解 (1) 先考虑$V(x)$的一个对角矩阵元$\langle\psi_1|V|\psi_1\rangle$

$$\langle\psi_1|V|\psi_1\rangle=\int (R(r)Y_{11})^* V(x,y,z)R(r)Y_{11}dV \tag{1}$$

球谐函数$(l=1)$可用 Descartes 坐标表示

$$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{x+\mathrm{i}y}{r}$$

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{2}{r}$$

$$Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{x-\mathrm{i}y}{r}$$

这里 $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$.

将 $V(\boldsymbol{r})$的表达式一起代入式(1)，有

$$\langle \psi_1 | V | \psi_1 \rangle = r_1 \int \left|\frac{R(r)}{r}\right|^2 G_{11}\left[Ax^2 + By^2 - (A+B)z^2\right]\mathrm{d}V \tag{2}$$

式中 r_1 是常数，而

$$G_{11} = (x+\mathrm{i}y)^*(x+\mathrm{i}y) = x^2 + y^2 \tag{6.118}$$

被积函数中

$$\begin{aligned}&\left(x^2+y^2\right)\left[Ax^2+By^2-(A+B)z^2\right]\\&=A\left(x^4+x^2y^2-x^2z^2-y^2z^2\right)+B\left(y^4+x^2y^2-x^2z^2-y^2z^2\right)\end{aligned} \tag{3}$$

由于 $\left|\frac{R(r)}{r}\right|^2$ 只依赖于 r，可设之为 $f(r)$，由对称应有

$$\int_{全空间} f(r)x^4\mathrm{d}V = \int_{全空间} f(r)y^4\mathrm{d}V \tag{4}$$

类似应有

$$\int f(r)x^2y^2\mathrm{d}V = \int f(r)y^2z^2\mathrm{d}V = \int f(r)z^2x^2\mathrm{d}V \tag{5}$$

将式(3)、式(4)、式(5)代入式(2)，有

$$\langle \psi_1 | V | \psi_1 \rangle = r(A+B)$$

式中

$$r = r_1\int f(r)(x^4 + x^2y^2 - x^2z^2 - y^2z^2)\mathrm{d}V = 常数$$

再考虑 $\langle \psi_1 | V | \psi_{-1} \rangle$ 矩阵元，它的积分式与式(2)类似，只是 G_{11} 被 $G_{1,-1}$ 代替，而 $G_{1,-1}$ 为

$$G_{1,-1} = -(x+\mathrm{i}y)^*(x-\mathrm{i}y) = -x^2 + y^2 + 2\mathrm{i}xy$$

于是有

$$\langle \psi_1 | V | \psi_{-1} \rangle = r_1\int f(r)G_{1,-1}\left[Ax^2 + By^2 - (A+B)z^2\right]\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z \tag{6}$$

由式(6)可见，有关 $G_{1,-1}$ 中第三项 $2\mathrm{i}xy$ 的积分将消失，因为此项对 x和y 来说都是奇函数，全空间积分后为零. 剩下的积分，易得

$$\langle \psi_1 | V | \psi_{-1} \rangle = -r(A-B)$$

类似有

$$\langle \psi_{-1} | V | \psi_1 \rangle = -r(A-B)$$

$$\langle\psi_{-1}|V|\psi_{-1}\rangle = r(A+B)$$

由于$\langle\psi_0|V|\psi_0\rangle$的积分式与式(6)相比，只是用$G_{0,0}=2z^2$代替了$G_{1,-1}$，易得到积分结果为

$$\langle\psi_0|V|\psi_0\rangle = -2r(A+B)$$

$V(\boldsymbol{r})$的其他矩阵元都为 0，因为它们的被积函数都是x,y,z的奇函数，最后得到$V(\boldsymbol{r})$的矩阵为

$$r\begin{pmatrix} A+B & 0 & -A+B \\ 0 & -2(A+B) & 0 \\ -A+B & 0 & A+B \end{pmatrix}$$

(2) 由轨道角动量与自旋角动量耦合理论可知$M_J=3/2,\ 1/2,\ -1/2,\ -3/2$的耦合态分别为

$$\left|\frac{3}{2}\right\rangle = \psi_1\alpha, \qquad \left|\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\sqrt{2}\psi_0\alpha + \psi_1\beta\right)$$

$$\left|-\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\psi_{-1}\alpha + \sqrt{2}\psi_0\beta\right), \qquad \left|-\frac{3}{2}\right\rangle = \psi_{-1}\beta$$

式中，α、β分别是S_z的本征值为$-\frac{1}{2}$和$\frac{1}{2}$的本征态. 容易看出

$$\left\langle\frac{3}{2}\right|V\left|\frac{3}{2}\right\rangle = \langle\psi_1\alpha|V|\psi_1\alpha\rangle = \langle\psi_1|V|\psi_1\rangle\langle\alpha|\alpha\rangle = r(A+B)$$

$$\left\langle\frac{3}{2}\right|V\left|\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\langle\psi_1\alpha|V|\sqrt{2}\psi_0\alpha + \psi_1\beta\rangle$$

$$= \sqrt{\frac{2}{3}}\langle\psi_1\alpha|V|\sqrt{2}\psi_0\alpha\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}\langle\psi_1\alpha|V|\psi_1\beta\rangle = 0$$

上面计算中考虑到V只是空间坐标的函数，与自旋变量无关. 且考虑到α,β态的正交归一性.

类似可求出其他矩阵元，及整个矩阵为

$$\begin{pmatrix} a & 0 & b & 0 \\ 0 & -a & 0 & b \\ b & 0 & -a & 0 \\ 0 & b & 0 & a \end{pmatrix} \tag{7}$$

式中

$$a = r(A+B), \qquad b = r\frac{B-A}{\sqrt{3}}$$

(3) 在自由离子情况下 4 个M_J态是简并的，所以基态的一阶能量修正由矩阵(7)的本征值给出，相应的本征函数是式(7)的本征矢. 若将矩阵的基矢的顺序由$M_J=3/2,1/2,-1/2,-3/2$改为$M_J=3/2,-1/2,-3/2,1/2$所得到的矩阵更易求解，这时矩阵变为

$$\begin{pmatrix} a & b & 0 & 0 \\ b & -a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a & b \\ 0 & 0 & b & -a \end{pmatrix}$$

变成 2 个 2×2 矩阵的直和. 由于 2 个 2×2 矩阵相同，故它们的本征值与本征矢相同，故仍有二重简并，由第 1 个 2×2 矩阵可得方程

$$\begin{pmatrix} a & b \\ b & -a \end{pmatrix}\begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$$

解出

$$\lambda = \pm\sqrt{a^2+b^2}, \qquad \frac{p}{q} = \frac{\lambda + a}{b}$$

令 $\tan\theta = b/a$，当 $\lambda = \sqrt{a^2+b^2}$ 时有

$$\frac{p}{q} = \frac{\sqrt{a^2+b^2}+a}{b} = \frac{1+\cos\theta}{\sin\theta} = \frac{\cos(\theta/2)}{\sin(\theta/2)}$$

由归一化条件 $p^2+q^2=1$，可知 $p=\cos(\theta/2), q=\sin(\theta/2)$. 类似对 $\lambda = -\sqrt{a^2+b^2}$ 时，有

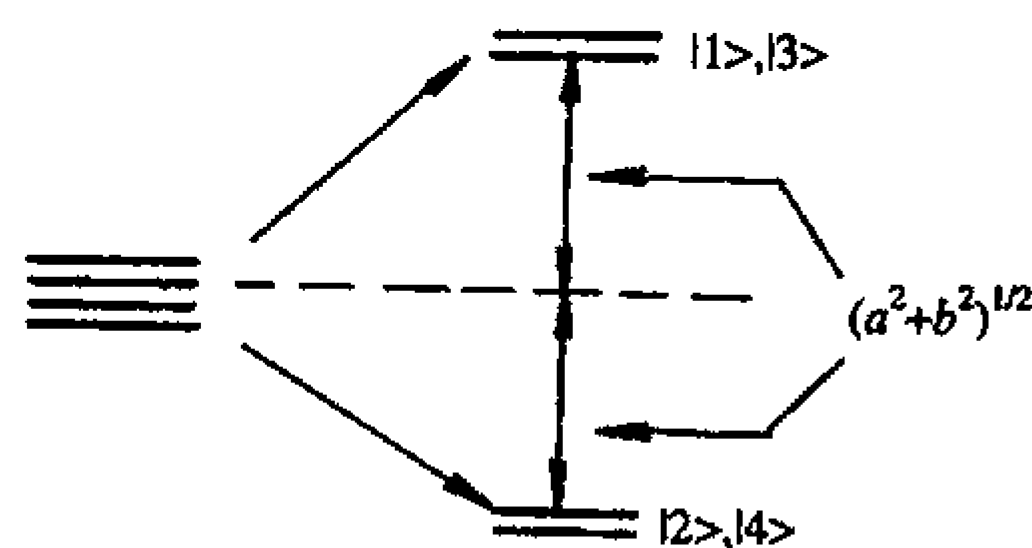
$$p = \sin(\theta/2), \qquad q = -\cos(\theta/2)$$

所以相对本征值 $\lambda = \pm\sqrt{a^2+b^2}$ 的本征态分别为

$$\begin{cases} \cos\dfrac{\theta}{2}\left|\dfrac{3}{2}\right\rangle + \sin\dfrac{\theta}{2}\left|-\dfrac{1}{2}\right\rangle = |1\rangle \\ \sin\dfrac{\theta}{2}\left|\dfrac{3}{2}\right\rangle - \cos\dfrac{\theta}{2}\left|-\dfrac{1}{2}\right\rangle = |2\rangle \end{cases}$$

同理对第 2 个 2×2 矩阵求解本征方程也可得到本征值 $\lambda' = \pm\sqrt{a^2+b^2}$，相应的本征矢为

$$\begin{cases} \cos\dfrac{\theta}{2}\left|-\dfrac{3}{2}\right\rangle + \sin\dfrac{\theta}{2}\left|\dfrac{1}{2}\right\rangle = |3\rangle \\ \sin\dfrac{\theta}{2}\left|-\dfrac{3}{2}\right\rangle - \cos\dfrac{\theta}{2}\left|\dfrac{1}{2}\right\rangle = |4\rangle \end{cases}$$



题图 6.87

晶体场离子的能级分裂如题图 6.87 所示.

第7章　散射问题

7.1　微分散截面 $\dfrac{d\sigma}{d\Omega}=|f(\theta,\phi)|^2$

题7.1　沿着z轴传播的粒子束被短程势所散射．如果离势场很远的地方$(r\gg 1)$的粒子的波函数可以表示为下面形式

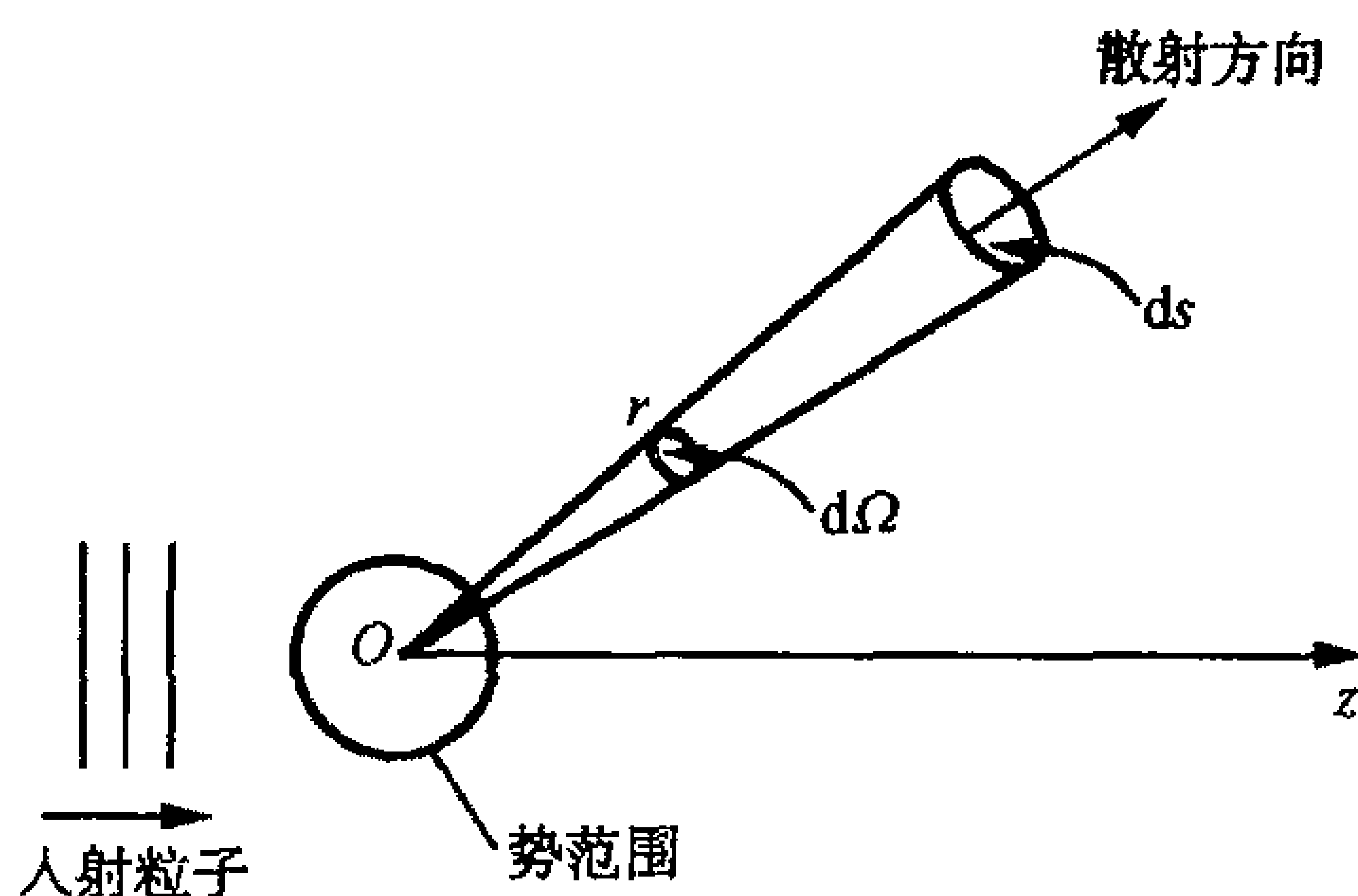
$$u=\exp(ikz)+\frac{1}{r}f(\theta,\phi)\exp(ikr)$$

试证明微分散射截面为

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=|f(\theta,\phi)|^2$$

解　考虑远离散射势范围的某处，垂直于r的小面元ds(题图7.1)，由图可知，$ds=r^2d\Omega$．设$u_i=\exp(ikz)$表示粒子数密度$\rho_i(r)=|u_i|^2=1$的入射粒子束的波函数，而$u_s=\dfrac{1}{r}f(\theta,\phi)\exp(ikr)$为散射粒子的波函数，散射粒子束的粒子数密度为

$$\rho_s(r)=|u_s|^2=\frac{|f(\theta,\phi)|^2}{r^2}$$



题图 7.1

因为单位时间通过小面元ds的散射粒子数为

$$dn_s=\rho_s\cdot \boldsymbol{v}\cdot ds=\frac{|f(\theta,\phi)|^2 v ds}{r^2}$$
$$=|f(\theta,\phi)|^2 v d\Omega$$

这里$\boldsymbol{v}$是散射粒子与入射粒子的速度．同时可知入射粒子束流密度(单位时间通过垂直传播方向单位面积的粒子数)是$J_\lambda=\rho_i v=v$．由微分散射的定义知

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\frac{dn_s}{J_\lambda d\Omega}=\frac{|f(\theta,\phi)|^2 v d\Omega}{v d\Omega}=|f(\theta,\phi)|^2$$

讨论 (1) u_i代表粒子数密度为1的入射粒子束，它不能归一化，因为$|u_i|^2$在全空间积分值无限大，但它能给出有限的粒子流密度. 另外，$\exp(ikz)$不能用来严格描述入射粒子束，因为它意味着平面无限大的平面波，即粒子束的横截面无限大，而实际上粒子束的横截面总是有限的. 为了描述有限横截面的入射粒子束，我们应用有一定波矢展宽的波包. 但当横截面的大小远大于粒子 de Broglie 波长的时候，$\exp(ikz)$还是可以近似用来描述入射粒子束.

(2) 当我们将测量散射粒子的探测器放在入射粒子流的外面，我们就可以用u_i和u_s分别代表入射粒子流和散射粒子流. 在散射角小时只要探测器有一小张角$\Delta\theta$，使u_i与u_s的干涉效应消失，同样也可以分别视u_i与u_s为入射粒子和散射粒子的波函数.

7.2 短程散射势p波的波函数及刚性球散射微分截面

题7.2 (1) 证明短程散射势外部的散射p波的波函数是

$$u(r,\theta)=\frac{1}{r}\left(1+\frac{\mathrm{i}}{kr}\right)\exp(\mathrm{i}kr)\cos\theta$$

(2) 以$\exp(\mathrm{i}kz)$代表的入射粒子束被半径为a的不可穿入刚性球散射，这里满足$ka\ll 1$. 在只考虑s、p波的情况下(近似到$(ka)^2$)，证明微分散射截面为

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}=a^2\left[1-\frac{1}{3}(ka)^2+2(ka)^2\cos\theta\right]$$

解 (1) p分波的关于θ的部分是$l=1$的函数$P_1(\theta)=\cos\theta$. 设p分波的径向波函数为$R(r)=\chi(r)/r$，则在势的外部$\chi(r)$应满足下列方程

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}r^2}+\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi=0 \tag{1}$$

对于题目给定的$u(r,\theta)$有

$$\chi(r)=\left(1+\frac{\mathrm{i}}{kr}\right)\exp(\mathrm{i}kr) \tag{2}$$

将式(2)微商二次代入式(1)，正好满足$l=1$时的方程，故得证.

(2) 在势的外面s、p波的波函数具有下列形式

$$u=\exp(\mathrm{i}kz)+\frac{A}{r}\exp(\mathrm{i}kr)+\frac{B}{r}\left(1+\frac{\mathrm{i}}{kr}\right)\exp(\mathrm{i}kr)\cos\theta \tag{3}$$

这里A、B为常数，含A项为s波，含B项为p波. 当$r\to\infty$时

$$u\to\exp(\mathrm{i}kz)+\frac{f(\theta)}{r}\exp(\mathrm{i}kr) \tag{4}$$

使得式(3)、式(4)中含有$\frac{1}{r}\exp(\mathrm{i}kr)$项相等，导致

$$f(\theta)=A+B\cos\theta \tag{5}$$

由于散射势是刚性球，故$r=a$时波函数应为零

$$\exp(\mathrm{i}ka\cos\theta)+\frac{A}{a}\exp(\mathrm{i}ka)+\frac{B}{a}\left(1+\frac{\mathrm{i}}{ka}\right)\exp(\mathrm{i}ka)\cos\theta=0 \tag{6}$$

将左边第一项展开，有

$$\exp(ika\cos\theta)=1+ika\cos\theta-\frac{1}{2}(ka)^2\cos^2\theta+o(k^3a^3) \tag{7}$$

将式(7)代入式(6)后，再略去高于$(ka)^2$的项，并考虑到$\cos^2\theta=\frac{1}{3}$，可得到方程

$$1-\frac{1}{6}(ka)^2+\frac{A}{a}\exp(ika)+\left[ika+\frac{B}{a}\left(1+\frac{i}{ka}\right)\exp(ika)\right]\cos\theta=0$$

为使上式恒等，须令上式左边含$\cos\theta$项与不含$\cos\theta$的项分别为零，得到两个方程即可解出A和B，它们分别是

$$A=-a\left[1-\frac{1}{6}(ka)^2\right]\exp(-ika) \tag{8}$$

$$B=-a(ka)^2 \tag{9}$$

在求B时考虑到因为$ka\ll 1$，所以$\frac{i}{ka}\gg 1$，且只考虑ka的2次以下的项. 在将式(6)代入式(7)后之所以不令$\cos^2\theta$项为零，是因为那样做还须考虑d波的贡献，而本题中没有考虑它.

将式(8)、式(9)代入式(5)，即可得

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=|f(\theta)|^2=|A+B\cos\theta|^2=a^2\left[1-\frac{1}{3}(ka)^2+2(ka)^2\cos\theta\right]$$

7.3　半径为R的刚球散射下s分波的热平衡温度

题 7.3　推导半径为R的刚球散射s分波截面的量子力学表达式.

解　刚球的作用相当于位势

$$v(r)=\begin{cases}\infty, & r<R\\ 0, & r>R\end{cases}$$

令s分波的径向波函数$R_0(r)=\chi_0(r)/r$，则

$$\chi_0''(r)+k^2\chi_0(r)=0,\qquad r>R$$
$$\chi_0(r)=0,\qquad r<R$$

解$r>R$的方程，得

$$\chi_0(r)=A\sin(kr+\delta_0),\qquad r>R$$

利用$r=R$时波函数的连续性条件，得

$$A\sin(kR+\delta_0)=0$$

所以

$$\delta_0=n\pi-kR,\quad \sin\delta_0=(-1)^{n+1}\sin kR,\qquad n=0,1,2,\cdots$$

于是s分波的总截面为

$$\sigma_t=\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0=\frac{4\pi}{k^2}\sin^2 kR$$

低能情形，$k\to 0$，$\sigma_t=4\pi R^2$.

高能情形，$k\to\infty$，$\sigma_t=0$.

7.4 气体内部原子-原子散射主要为s波的热平衡温度

题 7.4 氢原子之间势的范围约是4Å. 对于处在热平衡下的气体，粗略估计它的某一温度，当温度低于此温度时，原子-原子散射主要是s波.

解 此题是气体内部原子与原子散射，当主要是s波时，应有$ka<1$，这里k为入射原子的相对波矢，a为散射势的范围，因为$\hbar k=\mu v_r$，故有

$$\mu v_r\cdot a\leqslant\hbar$$

式中，$\mu=m/2$是两原子的折合质量，v_r是两原子之间的相对速率，$a=4$Å.

达到热平衡时

$$\langle v\rangle=0,\qquad \frac{1}{2}m\left\langle v^2\right\rangle=\frac{3}{2}kT$$

容易证得$\langle \boldsymbol{v}_1\cdot\boldsymbol{v}_2\rangle=0$，故相对速度的方均值为

$$\left\langle {v_r}^2\right\rangle=\left\langle (\boldsymbol{v}_1-\boldsymbol{v}_2)^2\right\rangle=2\left\langle v^2\right\rangle=\frac{6kT}{m}$$

于是上面不等式成为

$$\frac{m}{2}a\cdot\sqrt{\frac{6kT}{m}}\leqslant\hbar,\qquad T_{\max}=\frac{2\hbar^2}{3mka^2}\approx 2.0\mathrm{K}$$

这说明在平常温度下，必须考虑其他波的散射.

7.5 低能粒子被中心势$V(r)=-\frac{\hbar^2}{m}\left(\frac{\lambda}{\cosh\lambda r}\right)^2$散射时的截面

题 7.5 一非相对论的，质量为m的粒子被一中心势散射，这一中心势有如下的形式

$$V(r)=\frac{\hbar^2}{2m}U(r),\qquad U(r)=-2\left(\frac{\lambda}{\cosh\lambda r}\right)^2$$

式中，λ是一参数. 这一势有这样一个性质：当$E\to0$时，截面$\sigma(E)$越来越大，当$E=0$时，$\sigma(E)\to\infty$很明显，在E很小的条件下，$\sigma(E)$主要是由s分波贡献的. 所以低能E时，只需要计算s分波振幅就够了. 与此相关，为了数学上的方便，方程

$$\frac{\mathrm{d}^2\phi}{\mathrm{d}^2r}+A\phi=U(r)\phi,\qquad \text{其中}A\text{是一正的常数}$$

的通解为

$$\phi=\alpha(\lambda\tanh\lambda r-\mathrm{i}k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}+\beta(\lambda\tanh\lambda r+\mathrm{i}k)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}$$

式中，$k=\sqrt{A}$，且$\alpha,\ \beta$是积分常数. 记住$\tanh x=(\mathrm{e}^x-\mathrm{e}^{-x})/(\mathrm{e}^x+\mathrm{e}^{-x})$，计算$E\to0$时的$\sigma(E)$.

解 s分波的波函数是球对称的，方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{1}{r^2}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\phi(r)\right)+\frac{\hbar^2}{2m}U(r)\phi(r)=E\phi(r)$$

令$R(r)=\phi(r)r$，有

$$R''(r)+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-\frac{\hbar^2}{2m}U(r)\right]R(r)=0$$

即

$$R''(r)+\frac{2mE}{\hbar^2}R(r)=U(r)\,R(r)$$

所以

$$R(r)=\alpha(\lambda\tanh\lambda r-\mathrm{i}k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}+\beta(\lambda\tanh\lambda r+\mathrm{i}k)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}$$

$$k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

式中，因为$r\to0$时，$R(0)=0$，$\tanh\lambda r=\lambda r$，$\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}=1$，有

$$R(r)\big|_{r\to0}=\alpha(\lambda^2 r-\mathrm{i}k)+\beta(\lambda^2 r+\mathrm{i}k)=\alpha(-\mathrm{i}k)+\beta(\mathrm{i}k)=0$$

所以

$$\alpha=\beta$$

$r\to\infty$时，$\tanh\lambda r=1$，有

$$\begin{aligned}R(r)&=\alpha(\lambda-\mathrm{i}k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}+\beta(\lambda+\mathrm{i}k)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}\\&=\alpha\left[(\lambda-\mathrm{i}k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}+(\lambda+\mathrm{i}k)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}\right]\\&=\alpha\sqrt{\lambda^2+k^2}\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr-\mathrm{i}\alpha_1}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr+\mathrm{i}\alpha_1}\right]\\&=\alpha\sqrt{\lambda^2+k^2}\cdot2\cos(kr-\alpha_1)\\&=2\alpha\sqrt{\lambda^2+k^2}\sin\left(kr+\frac{\pi}{2}-\alpha_1\right)\end{aligned}$$

式中

$$\alpha_1=\arctan\frac{k}{\lambda}$$

所以

$$\delta_0=\frac{\pi}{2}-\alpha_1$$

$$\sigma_t=\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0=\frac{4\pi}{k^2}\cos^2\alpha_1$$

当$E\to0$时，$k\to0$，$\alpha_1\to0$，有

$$\sigma_t=\frac{4\pi}{k^2}=\frac{4\pi}{2mE/\hbar^2}=\frac{4\pi\hbar^2}{2mE}=\frac{2\pi\hbar^2}{mE}$$

7.6　粒子在势$V(r)=-C\delta(|\boldsymbol{r}|-a)$作用下的束缚态与散射截面

题 7.6　一个质量为m的粒子在三维情形下与一个球对称势作用：$V(r)=-C\delta(|\boldsymbol{r}|-a)$. 即这个作用势是一个$\delta$函数，除非粒子恰好处在与作用中心距离为$a$的位置上，否则势为零. 其中，$C$是个正的常数. (1) 求有一个束缚态存在的$C$的最小值；(2) 考虑一个散射实

验，其中粒子以低速入射到势阱中：在低入射速度的极限下，求散射截面及角分布.

解 (1) 设单粒子系统的束缚态本征波函数为

$$\psi(\boldsymbol{r}) = R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

径向函数 $R(r)$满足的方程为

$$R'' + \frac{2}{r}R' + \left[(\mathrm{i}k)^2 + \frac{2mC}{\hbar^2}\delta\left(|\boldsymbol{r}| - a\right) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R = 0 \tag{1}$$

式中，$k = \sqrt{-2mE/\hbar^2}$ (对束缚态 $E<0$).

当 $r \neq a$ 时，上述方程是一个虚宗量的球 Bessel 方程.

当 $r < a$ 时，为保证 $r \to 0$ 时束缚态有界

$$R(r) = A_k j_l(\mathrm{i}kr)$$

当 $r > a$ 时，为保证 $r \to \infty$ 时束缚态有界

$$R(r) = B_k h_l^{(1)}(\mathrm{i}kr)$$

当 $r = a$ 时，波函数是连续的，即

$$A_k j_l(\mathrm{i}ka) = B_k h_l^{(1)}(\mathrm{i}ka). \tag{2}$$

对方程(1)积分 $\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \mathrm{d}r$ ，得

$$R'(a+0) - R'(a-0) = -C'R(a), \qquad C' = \frac{2mC}{\hbar^2} \tag{3}$$

考虑至少有一个束缚态的情形，$l = 0$

$$R(r) = \begin{cases} Aj_0(\mathrm{i}kr) = A\dfrac{\sin(\mathrm{i}kr)}{\mathrm{i}kr}, & r < a \\ Bh_0^{(1)}(\mathrm{i}kr) = B\dfrac{(-1)\mathrm{e}^{-kr}}{kr}, & r > a \end{cases}$$

$$R'(a+0) = \frac{B}{k}\cdot\frac{\mathrm{e}^{-ka}}{a}\left(k + \frac{1}{a}\right) \tag{4}$$

$$R'(a-0) = \frac{A}{k}\left(\frac{k\cosh ka}{a} - \frac{\sinh ka}{a^2}\right) \tag{5}$$

由式(2)，式(4)，式(5)代入式(3)中，得

$$aC' = \frac{2ka}{1 - \mathrm{e}^{-2ka}}$$

由于 $x \geqslant 1 - \mathrm{e}^{-x}$ (当 $x \geqslant 0$)，故

$$C'_{\min} = \frac{1}{a}$$

所以 $C = \dfrac{\hbar^2}{2ma}$ 是保证有束缚态存在时最小的 C 值.

(2) 用分波法解. 当粒子以极低速度入射时，仅需考虑 $l = 0$ 的分波. 这时径向方程为

$$R'' + \frac{2}{r}R' + \left[k^2 + \frac{2mC}{\hbar^2}\delta(r - a)\right]R = 0$$

令 $R(r)=\chi_0(r)/r$ ，则

$$\chi_0''+\left[k^2+\frac{2mC}{\hbar^2}\delta(r-a)\right]\chi_0=0 \tag{6}$$

方程(6)满足 $r\to 0$ 有界条件及 $r\to\infty$ 的散射边界条件的解为

$$\chi_0(r)=\begin{cases}A\sin kr, & r<a\\ \sin(kr+\delta_0), & r>a\end{cases}$$

由波函数在 $r=a$ 处的连续性条件，得

$$A\sin ka=\sin(ka+\delta_0) \tag{7}$$

对方程(5)积分 $\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon}dr$ ，得

$$\chi_0'(a+\varepsilon)-\chi_0'(a-\varepsilon)=-\frac{2mC}{\hbar^2}\chi_0(a) \tag{8}$$

由式(7)，式(8)可得

$$\frac{ka}{\tan(ka+\delta_0)}-\frac{ka}{\tan ka}=-\frac{2mCa}{\hbar^2}$$

由此得 $(k\to 0)$

$$\tan\delta_0=\frac{ka}{1-\dfrac{2maC}{\hbar^2}}$$

或

$$\sin\delta_0=\frac{ka}{\sqrt{k^2a^2+\left(1-\dfrac{2maC}{\hbar^2}\right)^2}}\approx\frac{ka}{\left(1-\dfrac{2maC}{\hbar^2}\right)}$$

总散射截面为

$$\sigma_t=\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0\approx\frac{4\pi a^2}{\left(1-\dfrac{2maC}{\hbar^2}\right)^2}$$

而角分布为各向同性的.

7.7 粒子在中心势 $V(r)=-\dfrac{\hbar^2}{ma^2}\cdot\dfrac{1}{\cosh^2(r/a)}$ 中的散射

题 7.7 质量为 m 的一个粒子受到中心势 $V(r)=-\dfrac{\hbar^2}{ma^2}\cdot\dfrac{1}{\cosh^2(r/a)}$ 散射、势中的 a 是常数. 已知方程

$$\frac{d^2y}{dx^2}+k^2y+\frac{2}{\cosh^2x}y=0$$

有解 $y=e^{\pm ikx}(\tanh x\mp ik)$ ，计算能量为 E 时 s 分波对总散射截面的贡献.

解 考虑 s 分波径向波函数 $\chi_0(r)=rR(r)$ 满足的方程

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi_0(r)}{\mathrm{d}r^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E+\frac{\hbar^2}{ma^2}\cdot\frac{1}{\cosh^2(r/a)}\right]\chi_0(r)=0$$

作变换

$$x=r/a,\qquad \chi_0(r)=y(x)$$

则

$$\frac{\mathrm{d}^2y(x)}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}a^2y(x)+\frac{2}{\cosh^2 x}y(x)=0$$

根据题中所给，$y(x)$满足条件 $y(0)=0$ 的解为 $(k=\sqrt{2mE/\hbar^2})$

$$y(x)=\mathrm{e}^{iakx}(\tanh x-\mathrm{i}ak)+\mathrm{e}^{-iakx}(\tanh x+\mathrm{i}ak)$$

$$=2\cos akx\tanh x+2ak\sin akx$$

所以

$$\chi_0(r)=2\cos kr\tanh\frac{r}{a}+2ak\sin kr$$

$$\frac{1}{\chi_0}\cdot\frac{\mathrm{d}\chi_0}{\mathrm{d}r}=\frac{ak^2\cos kr-k\sin kr\tanh\frac{r}{a}+\frac{1}{a}\cos kr\,\mathrm{sec}\,h^2\frac{r}{a}}{ak\sin kr+\cos kr\tanh\frac{r}{a}}$$

$$\xrightarrow{r\to\infty}\frac{ak^2\cos kr-k\sin kr}{ak\sin kr+\cos kr}=k\frac{ak\cot kr-1}{\cot kr+ak}$$

另一方面，已知在无穷远处应有

$$\chi_0(r)=\sin(kr+\delta_0)$$

$$\frac{1}{\chi_0}\cdot\frac{\mathrm{d}\chi_0}{\mathrm{d}r}=k\cot(kr+\delta_0)=k\frac{\cot kr\cot\delta_0-1}{\cot kr+\cot\delta_0}$$

比较以上两式，得

$$\cot\delta_0=ak$$

$$\sin^2\delta_0=\frac{1}{1+\cot^2\delta_0}=\frac{1}{1+a^2k^2}$$

s 分波对总截面的贡献为

$$\sigma_t=\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0=\frac{4\pi}{k^2}\frac{1}{1+a^2k^2}=\frac{2\pi\hbar^2}{mE}\frac{1}{1+\frac{2a^2mE}{\hbar^2}}$$

7.8 无自旋粒子在吸引球方势阱上的散射

题 7.8 一个无自旋的粒子，质量为 m，能量为 E，以角θ在吸引势 $V(r)$上散射.

$$V(r)=\begin{cases}-V_0, & 0<r<a,\ V_0>0\\ 0, & r>a\end{cases}$$

(1) 求V_0, a, m满足什么关系时，在零能处($E=0$)的散射截面为零. 对于满足上述关系的参数，当$E\to 0$时，微分散射截面将有下列形式

$$\frac{\partial\sigma}{\partial\Omega}\xrightarrow[E\to 0]{} E^{\lambda}F(\cos\theta)$$

(2) 指数λ是多少? (3) 角分布函数$F(\cos\theta)$是$\cos\theta$的多项式. $\cos\theta$的最高次数是多少?

解 (1) 在能量很低时,只需考虑$l=0$分波. 设径向波函数为$R(r)=\chi(r)/r$,则$\chi(r)$满足方程

$$\begin{cases}\chi'+\dfrac{2mE}{\hbar^2}\chi=0, & r>a\\ \chi''+\dfrac{2m}{\hbar^2}(E+V_0)\chi=0, & 0<r<a\end{cases}$$

令$k=\sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$, $K=\sqrt{\dfrac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}$. 则方程的解具有形式

$$\chi(r)=\sin(kr+\delta_0),\qquad r>a$$

$$\chi(r)=A\sin Kr,\qquad 0<r<a$$

边界条件

$$\sin(ka+\delta_0)=A\sin Ka$$

$$k\cos(ka+\delta_0)=KA\cos Ka$$

即

$$K\tan(ka+\delta_0)=k\tan Ka$$

$$\delta_0=\arctan\left[\frac{k}{K}\tan(Ka)\right]-ka$$

当$k\to 0$时,

$$K\to K_0=\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}},\qquad \delta_0\to k\left(\frac{\tan K_0a}{K_0}-a\right)$$

按要求零能时截面

$$\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0\to 4\pi a^2\left(\frac{\tan K_0a}{K_0a}-1\right)^2=0$$

由此得到超越方程$\tan K_0a=K_0a$，即

$$\tan\left(\frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}a\right)=\frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}a$$

(2)、(3) 尽管$k\to 0$时，微分散射截面中$l=0$分波项趋于零，但仍是主要贡献之一. 对k作 Taylor 展开，略去k^3以上项

$$\tan Ka=\tan a\sqrt{k^2+K_0^2}=\tan K_0a+\frac{ak^2}{2\cos^2K_0a\cdot K_0}+\cdots$$

$$\delta_0 = \arctan\left(\frac{k}{K}\tan Ka\right) - ka$$
$$= \arctan\left[k\cdot\frac{1}{K_0}\left(1-\frac{k^2}{K_0^2}\right)\cdot\left(\tan K_0 a + \frac{ak^2}{2\cos^2 K_0 a\cdot K_0}\right)\right] - ka$$
$$= \arctan\left(ka + \frac{k^3 a}{2K_0^2\cos^2 K_0 a} - \frac{k^3 a}{K_0^2}\right) - ka$$
$$= \frac{k^3 a}{2K_0^2\cos^2 K_0 a} - \frac{k^3 a}{K_0^2} - \frac{k^3 a^3}{3}$$

它对$\frac{\partial\sigma}{\partial\Omega}$的贡献正比于$k^4$.

为了考察$l=1$项的贡献，我们先求出其径向波函数. 径向波函数满足方程

$$\frac{1}{r^2}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}R\right) + \left(k^2 - \frac{2}{r^2} + k_0^2\right)R = 0, \qquad r<a$$
$$\frac{1}{r^2}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}R\right) + \left(k^2 - \frac{2}{r^2}\right)R = 0, \qquad r>a$$

其解为一阶球 Bessel 函数

$$R_1 = \begin{cases} \dfrac{\sin Kr}{(Kr)^2} - \dfrac{\cos Kr}{Kr}, & 0<r<a \\ A\left[\dfrac{\sin(kr+\delta_1)}{(kr)^2} - \dfrac{\cos(kr+\delta_1)}{kr}\right], & r>a \end{cases}$$

利用边界$r=a$处的连接条件，即R_1和$(r^2R_1)'$连续，得

$$\frac{\sin Ka}{(Ka)^2} - \frac{\cos Ka}{Ka} = A\left[\frac{\sin(ka+\delta_1)}{(ka)^2} - \frac{\cos(ka+\delta_1)}{ka}\right]$$
$$\sin Ka = A\sin(ka+\delta_1)$$

所以

$$\cot(ka+\delta_1) = \frac{1}{ka} - \frac{k}{K^2 a} + \frac{k\cot Ka}{K} = \frac{1}{ka}\left(1 - \frac{k^2}{K^2} + \frac{k^2 a\cot Ka}{K}\right)$$
$$\tan(ka+\delta_1) = ka\left(1 + \frac{k^2}{K^2} - \frac{k^2 a\cot Ka}{K} + o(k^3)\right)$$
$$= ka + o(k^4)$$

所以

$$\delta_1 = \arctan\left[ka + o(k^4)\right] - ka = -\frac{1}{3}(ka)^3 + o(K^4)$$

对$\frac{\partial\sigma}{\partial\Omega}$的贡献也正比于$k^4$.

类似，可解出$l=2$的径向波函数为

$$R_2=\begin{cases}\left[\dfrac{3}{(Kr)^3}-\dfrac{1}{Kr}\right]\sin Kr-\dfrac{3}{(Kr)^2}\cos Kr, & 0<r<a\\ \left[\dfrac{3}{(kr)^3}-\dfrac{1}{kr}\right]\sin(kr+\delta_2)-\dfrac{3}{(kr)^2}\cos(kr+\delta_2), & r>a\end{cases}$$

利用连接条件，在 $r=a$ 处 R_2 和 $(r^2R_2)'$ 连续，得

$$\frac{\left[\dfrac{3}{(ka)^3}-\dfrac{1}{ka}\right]\tan(ka+\delta)-\dfrac{3}{(ka)^2}}{\left[\dfrac{3}{(Ka)^3}-\dfrac{1}{Ka}\right]\tan Ka-\dfrac{3}{(Ka)^2}}=\frac{k\left[ka\tan(ka+\delta_2)-(ka)^2\right]}{K\left[Ka\tan Ka-(Ka)^2\right]}$$

令 $y=\tan(ka+\delta_2)-ka$，则

$$\left[\frac{3}{(ka)^3}-\frac{1}{ka}\right]y-1=\frac{y(-1+o(k))}{bK^2(1+o(K^2))}$$

式中，$b=\dfrac{a}{2\cos^2 K_0a-K_0}$，所以

$$\begin{aligned}y&=\frac{1}{\dfrac{3}{(ka)^3}-\dfrac{1}{ka}+\dfrac{1}{bK^2}+o(k)}\\&=\frac{1}{\dfrac{3}{(ka)^3}\left[1-\dfrac{(ka)^2}{3}+\dfrac{(ka)^3}{3bK^2}+o(k^4)\right]}\\&=\frac{(ka)^3}{3}\left[1+\frac{(ka)^2}{3}-\frac{(ka)^3}{3bK^2}+o(k^4)\right]\\&=\frac{(ka)^3}{3}+\frac{(ka)^5}{9}+o(k^6)\end{aligned}$$

$$\delta_2=o(k^4)$$

可以肯定 $l>2$ 各分波的贡献将更小. 由

$$\frac{\partial\sigma}{\partial\Omega}=|f(\theta)|^2=\frac{1}{k^2}\left|\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i\delta l}\sin\delta_l P_l(\cos\theta)\right|^2$$

可知

$$\frac{\partial\sigma}{\partial\Omega}\xrightarrow[E\to0]{}k^4F(\cos\theta)\sim E^2F(\cos\theta)$$

指数λ为2，角分布函数作为 $\cos\theta$ 的多项式，其次数也为 2.

7.9 球壳势$V(r)=\alpha\delta(r-r_0)$作用下，Schrödinger方程的散射态解和束缚态存在条件

题 7.9 Schrödinger方程中的势为球壳势$V(r)=\alpha\delta(r-r_0)$，(1) $E>0$时s态($l=0$)波函数如何？需写出确定相移δ的方程. 对于$\hbar k=\sqrt{2mE}$，证明当$k\to 0$时，$\delta\to Ak$，这里A是一个常数(叫做碰撞长度). 将A写成α和r_0的函数. (2) $l=0$时有多少个束缚态，它们的存在怎样依赖于α.(一个图示即可). (3) 当存在一个$E=0$的束缚态时的散射长度是多大？描述当α从正变负并增加到束缚时A的行为. A的范围对不同的α也不同吗？作A对α的草图.

解 (1) Schrödinger方程($l=0$)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{1}{r^2}\cdot\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\psi\right)+V(r)\psi=E\psi$$

在$\psi=\mu/r$下化为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\mu''+\alpha\delta(r-r_0)\mu=E\mu$$

或

$$\mu''-\beta\delta(r-r_0)\mu=-k^2\mu$$

式中

$$\beta=\frac{2m\alpha}{\hbar^2},\qquad k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

得

$$\mu=\begin{cases}a'\sin kr, & r<r_0\\ a\sin(kr+\delta), & r>r_0\end{cases}$$

由边界条件有

$$\begin{cases}a'\sin kr_0=a\sin(kr_0+\delta)\\ a'\dfrac{\beta}{k}\sin kr_0=a\cos(kr_0+\delta)-a'\cos kr_0\end{cases}$$

则

$$\tan(kr_0+\delta)=\frac{\tan kr_0}{1+\dfrac{\beta}{k}\tan kr_0}$$

在极限情况，kr_0，$\delta\to 0$时

$$\delta\to\frac{-r_0}{1+\dfrac{\hbar^2}{2m\alpha r_0}}k=Ak,$$

$A = \dfrac{-r_0}{1+\dfrac{\hbar^2}{2m\alpha r_0}}$ 称碰撞长度.

(2) 束缚态 Schrödinger 方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\mu'' + \alpha\delta(r-r_0)\mu = E\mu$$

化成

$$\mu'' - \beta\delta(r-r_0)\mu = k^2\mu$$

式中

$$\beta = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}, \qquad k^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$$

解为

$$\mu = \begin{cases} a'\sin kr, & r < r_0 \\ ae^{-kr}, & r > r_0 \end{cases}$$

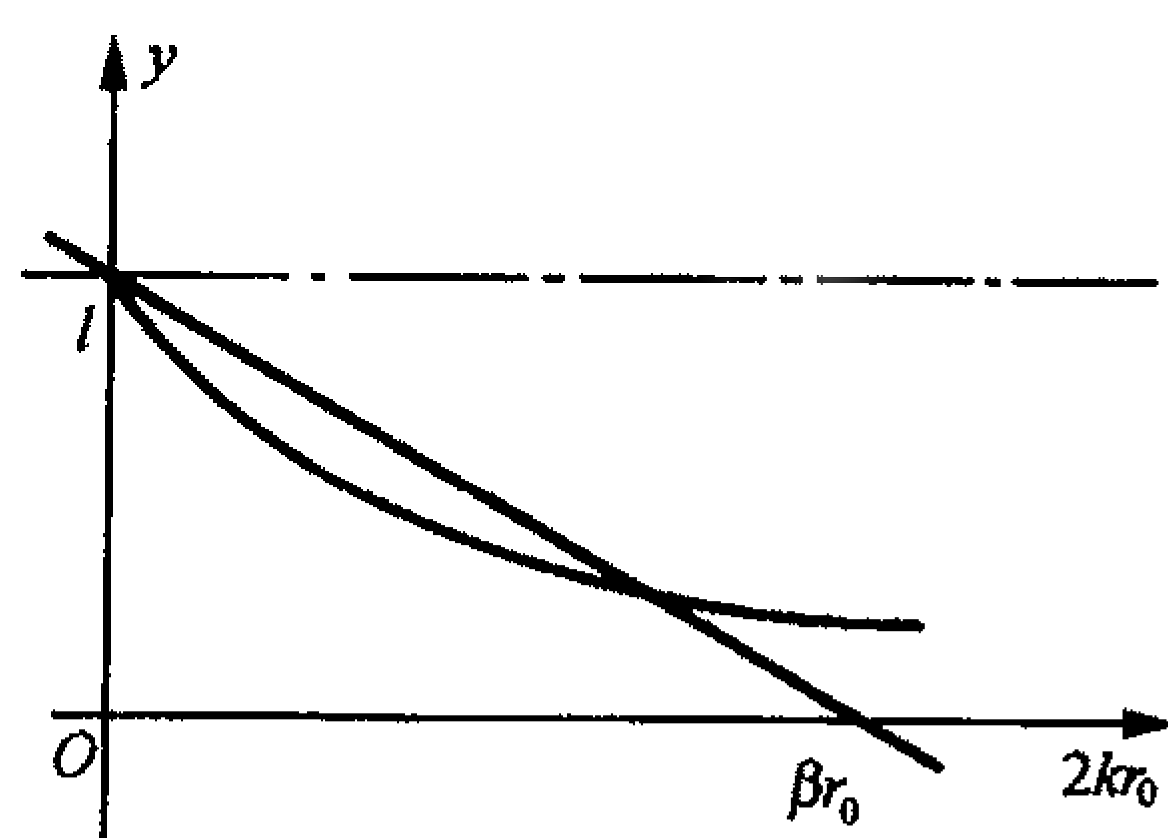
有边界条件

$$\begin{cases} a'\sinh kr_0 = ae^{-kr_0} \\ \beta ae^{-kr_0} = -ake^{-kr_0} - a'k\cosh kr_0 \end{cases}$$

化简得

$$e^{-2kr} = 1 + \frac{2kr_0}{\beta r_0}$$

从下面的题图 7.9(a)所示易见仅当 $0 > \dfrac{1}{\beta r_0} > -1$ 时才有束缚态存在，这时有 $\dfrac{2mr_0\alpha}{\hbar^2} < 1$.



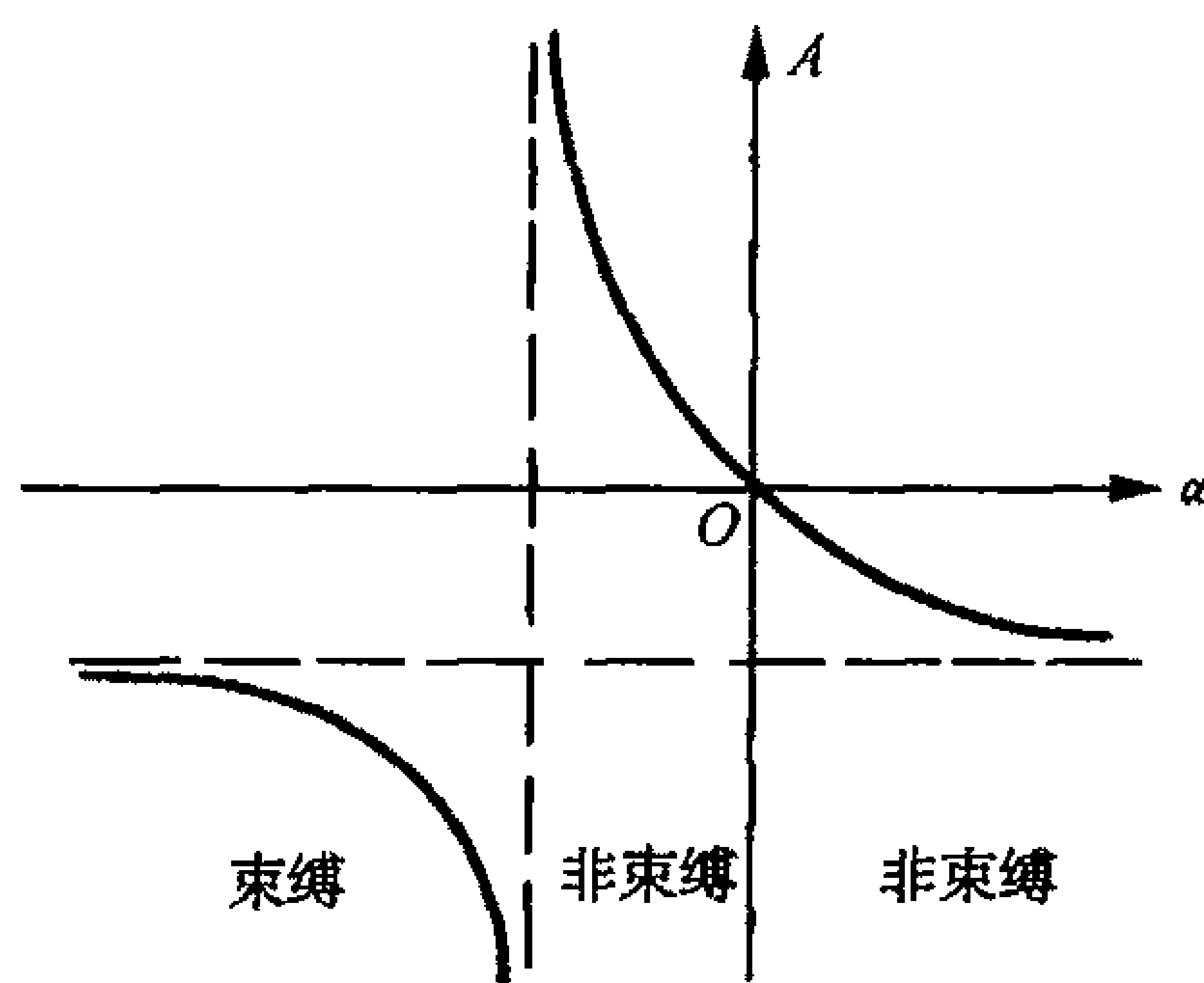
题图 7.9(a)

(3) 当 α 改变趋近于有一个 $E \sim 0$ 的束缚态时，从(2)的结果可知 $\beta r_0 \to -1$，代入

$$\tan(kr_0 - \delta) = \frac{\tan kr_0}{1 + \dfrac{\beta r_0}{kr_0}\tan kr_0}$$

中，易知 $\delta \to \pm\pi/2$，$A \to \infty$.

对 A 的行为可作如下的草图(题图 7.9(b)).



题图 7.9(b)

7.10 氦核的两个最低不稳定能级对氦气的α粒子散射的影响

题 7.10 核 ^{8}Be 相对于离解成两个 α 粒子来说是不稳定的. 但核反应实验定出该核的两个最低不稳定能级如下：

$J=0$，偶宇称，高于离解能级约 95keV.

$J=2$，偶宇称，高于离解能级约 3MeV.

考虑由于这些能级存在将对氦气与 α 粒子之间散射产生怎样影响，特别：(1) 写出 $r\to\infty$ 时弹性散射波函数的分波表达式. (2) 定性描述作为能量函数的相应相移在每个能级附近如何变化. (3) 描述该变化对 α 粒子的角分布有何影响.

解 (1) 首先由于 α 粒子是自旋为零的粒子，两个 α 粒子(全同粒子)组成的体系由于 Bose-Einstein 统计的限制，相互运动角动量量子数 l 只能为偶数，即分波展开式中只有 l 为偶的部分. 现在附加相移有两部分：Coulomb 相互作用引起的 δ_l^C 与核力引起的 δ_l^N. 所以当 $r\to\infty$ 时，波函数

$$\psi=\sum_{l=0,2,4,\cdots}(2l+1)\mathrm{i}^l\mathrm{e}^{\mathrm{i}}(\delta_l^C+\delta_l^N)(kr)^{-1}$$

$$\cdot\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l^C+\delta_l^N-\gamma\ln 2kr\right)P_l(\cos\theta)$$

式中，k 为质心系中测得的波数，$\gamma=(2e)^2/\hbar v_r$.

(2) 在能量逐渐增大到一定值过程中，由于受核引力作用，δ_l^N 由零逐渐增大. 特别地，当能量接近或离开具有确定 l 的复合核不稳定能级时，每个 δ_l^N 在 $n\pi$ 弧度附近较快地变化. 对 ^{8}Be 情况，$l=0$ 时，在 95keV 附近，$l=2$ 时在 3MeV 附近出现以上情况.

一般说来，在能量低于 Coulomb 势垒，即当 r 在核力作用范围内但 Coulomb 斥力与离心力共同作用使得相应的分波振幅减小处，核力的作用是可以忽略的. 在这种情况下，δ_l^N 保持在 0 (或 $n\pi$)附近，除非在共振点附近 δ_l^N 增大到π. 近似取 He^{2+} 半径 R 为 1.5×10^{-13}cm. 则当两 α 粒子接触时的 Coulomb 位垒高约为 $(2e)^2/2R\sim 2$MeV. 这样 95keV, $l=0$ 的共振峰宽度由于 Coulomb 势垒而被大大减小，或者说 δ_l^N 升得很快，而 $l=2$ 的共振峰仍然保持较

宽.

(3) 为了展示核力对角分布的影响，我们改写分波展开如下

$$\psi=\sum_{l=0,2,4,\cdots}^{\infty}(2l+1)\mathrm{i}^l\exp\left(\mathrm{i}\delta_l^C\right)(kr)^{-1}\left\{\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}-\gamma\ln 2kr+\delta_l^C\right)\right.$$

$$\left.+\left(\frac{\exp[2\mathrm{i}\delta_l^N-1]}{2\mathrm{i}}\right)\exp\mathrm{i}\left(kr-\frac{l\pi}{2}-\gamma\ln 2kr+\delta_l^C\right)\right\}P_l(\cos\theta)$$

式中，大括号中前一项是未受核力影响的 Coulomb 散射波函数，并可对 l 相加后得

$$\exp\mathrm{i}\left\{kr\cos\theta-\gamma\ln\left[kr(1-\cos\theta)\right]+\delta_o^C\right\}-\gamma(kr)^{-1}$$

$$\cdot\exp\mathrm{i}\left[kr\cos\theta-\gamma\ln(kr)+\delta_o^C\right]\sqrt{\frac{1}{2}}$$

$$\cdot\left\{\frac{\exp\left[-\mathrm{i}\gamma\ln(1-\cos\theta)\right]}{1-\cos\theta}+\frac{\exp\left[-\mathrm{i}\gamma\ln(1+\cos\theta)\right]}{1+\cos\theta}\right\}$$

最后括号中两项起源于两个 He^{2+} 的全同性，这在一般 Rutherford 散射中不出现.

上面 ψ 展开式大括号中第二项贡献源于核力造成的向外传播波. 它的振幅在各方向上与 Coulomb 散射振幅相干涉，当 δ_l^N 保持在π整数倍附近，例如，能量低于 Coulomb 位垒时，两者的相干效应很小. 注意后一项振幅在 δ_l^N 比 $n\pi$ 大一些和比 $n\pi$ 小一些时符号相反. 尽管共振发生在低能处相应的干涉效应探测起来也会很显著.

7.11 弹性截面的上下限

题 7.11 考虑有非弹性散射的量子力学散射问题. 假设我们有形如下式的弹性散射道散射振幅的分波展开

$$f(k,\theta)=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\frac{\eta_l\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_l}-1}{2\mathrm{i}k}P_l(\cos\theta)$$

式中，$\delta_l(k)$ 和 $\eta_l(k)$ 是实量，且 $0<\eta_l\leqslant 1$. 波数用 k 标志. θ 是散射角. 对于一给定的分波，求出用 $\sigma_{\text{非弹性}}^{(l)}$ 表示的弹性截面 $\sigma_{\text{弹性}}^{(l)}$ 的上、下限.

解

$$\sigma_{\text{弹性}}^{(l)}=\pi\lambda^2(2l+1)\left|1-\eta_l\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_l}\right|^2$$

$$\sigma_{\text{非弹性}}^{(l)}=\pi\lambda^2(2l+1)\left(1-\left|\eta_l\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_l}\right|^2\right)$$

式中，$\lambda^2=\dfrac{\lambda}{2\pi}=\dfrac{1}{k}$，所以

$$\sigma_{\text{弹性}}^{(l)}=\frac{\left|1-\eta_l\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_l}\right|^2}{1-\left|\eta_l\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_l}\right|^2}\sigma_{\text{非弹性}}^{(l)}$$

由于 η_l，δ_l 为实量，且 $0<\eta_l\leqslant 1$，所以

$$\frac{(1-\eta_l)^2}{1-\eta_l^2} \leqslant \frac{\left|1-\eta_l e^{2i\delta_l}\right|^2}{1-\left|\eta_l e^{2i\delta_l}\right|^2} \leqslant \frac{(1+\eta_l)^2}{1-\eta_l^2}$$

$$\frac{(1-\eta_l)^2}{1-\eta_l^2}\sigma^{(l)}_{\text{非弹性}} \leqslant \sigma^{(l)}_{\text{弹性}} \leqslant \frac{(1+\eta_l)^2}{1-\eta_l^2}\sigma^{(l)}_{\text{非弹性}}$$

所以$\sigma^{(l)}_{\text{弹性}}$的上、下限分别为

$$\frac{(1+\eta_l)^2}{1-\eta_l^2}\sigma^{(l)}_{\text{非弹性}}, \qquad \frac{(1-\eta_l)^2}{1-\eta_l^2}\sigma^{(l)}_{\text{非弹性}}$$

7.12 波数为k的慢中子被半径R的中性原子散射时相移δ与k的关系

题 7.12 一个波数为k的慢电子被一个有效(最大)半径为R的中性原子散射，$kR \ll 1$. (1) 假定电子-原子势是已知的,请解释相关的相移δ如何与 Schrödinger 方程的解联系起来. (2) 给出以δ和k表示的微分散射截面公式. (如果你记不起这个公式，请用量纲分析法猜出). (3) 用一个 Schrödinger 方程解的图象说明一个非零纯吸引势可以在一个特定的k上没有散射. (4) 请再用一个图像解释一个在短程为吸引、长程为排斥的势如何能在一个特定的k外给出共振散射. (5) 在共振峰中央总散射截面的极大值为多少?

解 (1) 由于$kR \ll 1$，故只需要考虑 s 波. 在远距离处 Schrödinger 方程的解有渐近形式

$$\psi(r) \to \frac{\sin(kr+\delta)}{kr}$$

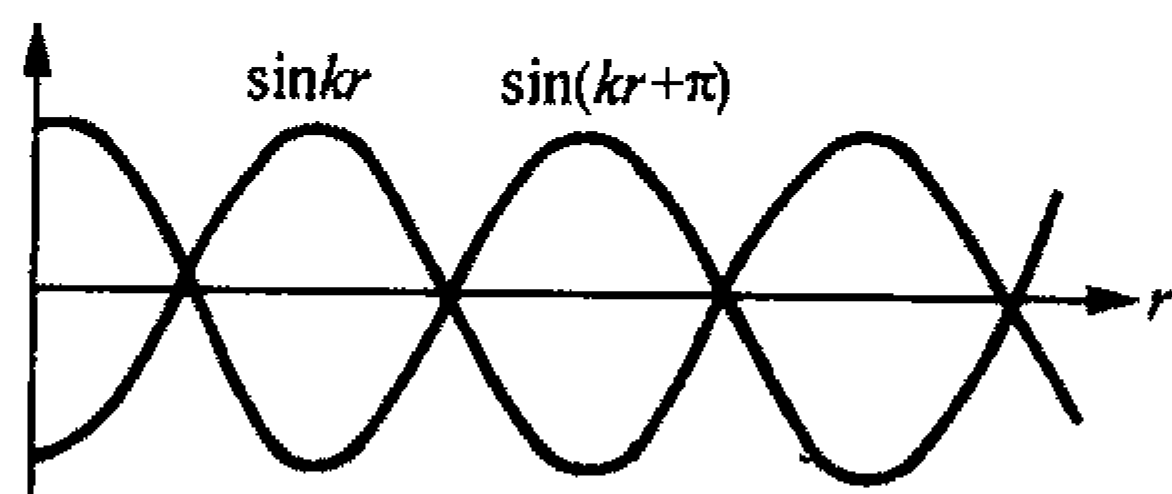
这就把δ与方程解联系起来了.

(2) 所要求的微分散射截面公式为

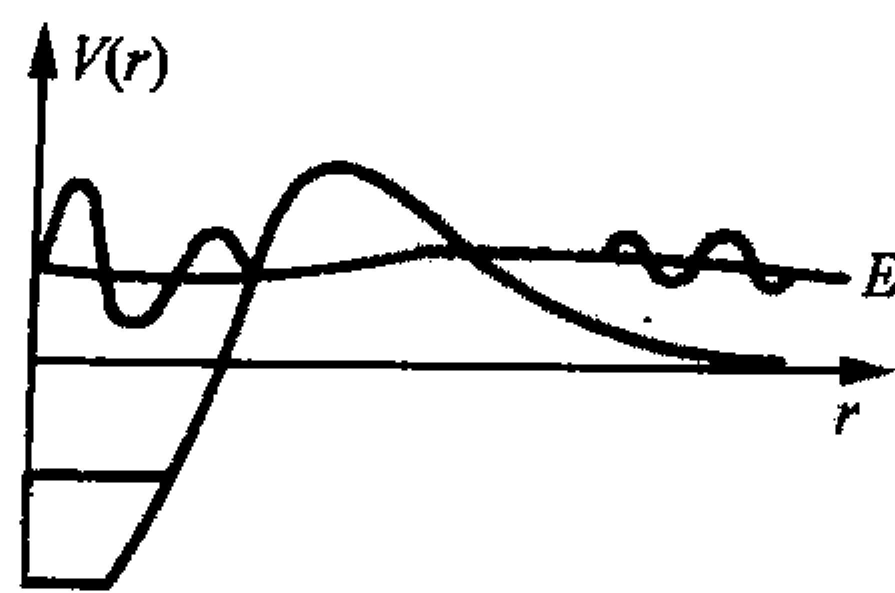
$$\sigma(\theta) = \frac{\sin^2\delta}{k^2}$$

(3) 当$\delta = n\pi$时，$\sigma(\theta)=0,\ \sigma_t = 0$. (相移$\delta$一般说来，是波数$k$的函数)图形如题图7.12(a)所示(渐近解).

(4) 如题图 7.12(b)给出的势，当入射粒子的能量接近势阱的(束缚态)本征值时，阱内与阱外的波函数强烈耦合，在阱内的波函数具有较大的幅度值，即发生了共振散射.



题图 7.12(a)



题图 7.12(b)

(5) 在共振峰中心的总散射截面的极大值为$4\pi R^2$，这里R为力程.

7.13 吸引球方势阱下，正能量粒子的$l=0$分波的相移δ_0与能量的关系

题 7.13 对吸引的球方势阱$V=-V_0,\ r<a;\ V=0,\ r>a$，求出正能量下$l=0$的相移δ_0的能量依赖关系. 由此证明，高能时$\delta(k)\to\dfrac{maV_0}{\hbar^2 k}$，并从 Born 近似得出这个结果.

解 设$\chi=rR$，则对$l=0$分波有

$$\chi''+k'^2\chi=0,\quad k'^2=k^2\left(1+\frac{V_0}{E}\right),\qquad r<a$$

$$\chi''+k^2\chi=0,\quad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2},\qquad r>a$$

故有

$$\chi=\begin{cases}\sin k'r, & r<a\\ A\sin(kr+\delta_0), & r>a\end{cases}$$

由连接条件

$$(\ln\chi)'\big|_{r=a^-}=(\ln\chi)'\big|_{r=a^+}$$

得决定δ_0的方程

$$k'\cot k'a=k\cot(ka+\delta_0)$$

令$k\to\infty$，得

$$\delta_0\to(k'-k)a=k\frac{V_0}{2E}a=\frac{maV_0}{\hbar^2 k}$$

另一方面，从 Born 近似和分波法相比较得

$$\delta_0\approx-\frac{2mk}{\hbar^2}\int_0^\infty V(r)j_0^2(kr)r^2\mathrm{d}r=\frac{2mk_0V_0}{\hbar^2}\int_0^a\frac{\sin^2 kr}{k^2}\mathrm{d}r$$

$$=\frac{2mV_0}{\hbar^2k^2}\int_0^{ka}\sin^2 t\mathrm{d}t=\frac{mV_0}{\hbar^2k^2}\left(ka-\frac{1}{2}\sin 2ka\right)$$

当$k\to\infty$时，$\delta_0\to\dfrac{mV_0a}{\hbar^2k}$.

7.14 吸引球方势阱下，低能粒子的散射截面，并与 Born 近似比较

题 7.14 对势为$V=-V_0,\ r<a;\ V=0,\ r>a$的低能粒子，计算其散射截面. 并将结果与 Born 近似结果相比较.

解 设$\chi=rR$, R为径向波函数，则有

$$\chi_l''(r)+\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi_l(r)=0,\qquad r>a,\ k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\chi_l''(r)+\left[k'^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi_l(r)=0,\qquad r<a$$

$$k'^2=\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}$$

由低能条件，计算 s 分波，$l=0$，

$$\chi_l''(r)+k^2\chi_l(r)=0, \qquad r>a$$

$$\chi_l''(r)+k'^2\chi_l(r)=0, \qquad r<a$$

波函数的解形式为

$$\chi_l(r)=\begin{cases} A\sin(k'r), & r<a \\ A'\sin(kr+\delta_0), & r>a \end{cases}$$

连续性条件为 $(\ln\chi_l)'$ 在 $r=a$ 处连续

所以

$$k'a\cot k'a = ka\cot(ka+\delta_0)$$

$$\tan(ka+\delta_0)=\frac{k}{k'}\tan k'a$$

$$\delta_0=\arctan\left(\frac{k}{k'}\tan k'a\right)-ka$$

当 $k\to 0$，$k'\to k_0=\sqrt{\dfrac{2mV_0}{\hbar^2}}$

$$\frac{k}{\tan(ka+\delta_0)}=\frac{k_0}{\tan k_0 a}$$

为常数，所以

$$ka+\delta_0\to 0$$

$$\tan(ka+\delta_0)\approx ka+\delta_0$$

所以

$$\delta_0\approx ka\left(\frac{\tan k_0 a}{k_0 a}-1\right)$$

$$\sigma\approx\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0\approx\frac{4\pi}{k^2}\delta_0^2=4\pi a^2\left(\frac{\tan k_0 a}{k_0 a}-1\right)^2$$

当 $k_0 a\ll 1$ 时

$$\sigma\approx 4\pi a^2\left[\frac{1}{3}(k_0 a)^2\right]^2=\frac{16\pi a^6 m^2 V^2}{9\hbar^4}$$

在 Born 近似下

$$f(\theta)=-\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty V(r)\frac{\sin qr}{qr}r^2\mathrm{d}r=\frac{2mV_0}{\hbar^2 q}\int_0^a r\sin qr\mathrm{d}r$$

$$=\frac{2mV_0}{\hbar^3 q^3}(\sin qa-qa\cos qa)$$

式中，$q=2k\sin\dfrac{\theta}{2}$

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2=\frac{4m^2V_0^2}{\hbar^4 q^6}(\sin qa-qa\cos qa)^2$$

当 $k\to 0$，$q\to 0$

$$\sin qa \approx qa - \frac{1}{3!}(qa)^3, \qquad \cos qa \approx 1 - \frac{1}{2!}(qa)^2$$

所以

$$\sigma(\theta) \approx \frac{4m^2V_0^2a^6}{q\hbar^4}$$

最后得

$$\sigma = \int \mathrm{d}\Omega\sigma(\theta) = \frac{16\pi m^2V_0^2a^6}{q\hbar^4}$$

可见，当 $k \to 0$，且 $k_0a \ll 1$ 时，两种方法结果一致. 其物理意义如下：分波法时只计算 s 分波，条件为 $l_{\max} \leqslant ka \sim 0$，即 $ka \ll 1$，而 Born 近似适用条件为 $k \gg k_0$. 当 $k_0a \ll ka \ll 1$ 时，两者的成立条件同时满足，结果也就一致.

7.15 导出一级 Born 近似下，散射波函数满足的微分方程

题 7.15 在势 $V(r)$ 的散射下，波函数可写成一个入射平面波加上出射散射波

$$\psi = \mathrm{e}^{ikz} + \phi(r)$$

导出第一级 Born 近似下 $\phi(r)$ 的微分方程.

解法一 粒子入射能为 E，令

$$U = \frac{2m}{\hbar^2}V, \qquad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

则 Schrödinger 方程为

$$(\nabla^2 + k^2)\psi = U\psi$$

相应的 Green 函数方程为

$$(\nabla^2 + k^2)G(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') = -4\pi\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')$$

因此

$$G(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') = \frac{\exp(\mathrm{i}k|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|)}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|}$$

得波函数为

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \psi_0(\boldsymbol{r}) - \frac{1}{4\pi}\int \mathrm{d}^3r' G(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')U(r')\psi(\boldsymbol{r}')$$

入射波为平面波 $\mathrm{e}^{ikz'}$，在一级 Born 近似下作以下近似代换

$$U(r')\psi(\boldsymbol{r}') \leftrightarrow U(r')\mathrm{e}^{ikz'}$$

因此

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \mathrm{e}^{ikz} - \frac{1}{4\pi}\int \frac{\exp(\mathrm{i}k|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|)}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|}U(r')\mathrm{e}^{ikz'}\mathrm{d}^3r'$$

与入射波比较，得散射波 $\phi(r)$ 为

$$\phi(r) = -\frac{1}{4\pi}\int \frac{\exp(\mathrm{i}k|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|)}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|}U(r')\mathrm{e}^{ikz'}\mathrm{d}^3r'$$

两边作用算子(∇^2+k^2)，由 Green 函数方程得

$$(\nabla^2+k^2)\phi(r)=-\frac{1}{4\pi}\int(\nabla^2+k^2)\frac{\exp(ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}U(r')\,e^{ikz'}d^3r'$$

$$=\int\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')U(r')e^{ikz'}d^3r'$$

$\phi(r)$ 满足的微分方程在一阶 Born 近似下为

$$(\nabla^2+k^2)\phi(r)=U(r)e^{ikz}$$

解法二 Schrödinger 方程为

$$(\nabla^2+k^2)\psi=U\psi$$

式中，$k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$，$U=\frac{2m}{\hbar^2}V$. 将$\psi=e^{ikz}+\phi(r)$代入上述方程，得

$$(\nabla^2+k^2)e^{ikz}+(\nabla^2+k^2)\phi(r)=U\left[e^{ikz}+\phi(r)\right]$$

或

$$(\nabla^2+k^2)\phi(r)=\frac{2m}{\hbar^2}V\left[e^{ikz}+\phi(r)\right]$$

作一级 Born 近似，即令上式右端$e^{ikz}+\phi(r)\approx e^{ikz}$，得所求方程

$$(\nabla^2+k^2)\phi(r)\approx\frac{2m}{\hbar^2}Ve^{ikz}$$

7.16 当 Hamilton 量绕任意轴旋转不变时，不能说散射振幅$f(\theta,\phi)$与θ无关

题 7.16 一个给定势的散射的量子理论给出下列波函数的渐近表达式

$$\psi(r)\xrightarrow[r\to\infty]{}e^{ikz}+f(\theta,\phi)\frac{e^{ikr}}{r}$$

(1) 如果总 Hamilton 量旋转不变，给出散射振幅f应不依赖于ϕ的讨论. (2) 为什么这个讨论不能推广为(考虑沿任意轴旋转)f也不依赖于θ? (3) 当入射波能量趋于0时，再次考虑(2). (4) 如何用f表示出散射截面的公式? (5) f的一级 Born 近似公式是什么? (务必定义你所引入的量). (6) Born 近似适用的条件是什么?

解 (1) 首先我们知道入射波$e^{ikz}=e^{ikr\cos\theta}$是角动量第三分量$l_z$的本征态. 本征值$m=0$当总的 Hamilton 量旋转不变时，角动量守恒，所以出射波仍应为l_z的本征值为$m=0$的本征态，即应有

$$l_zf(\theta,\phi)=mf(\theta,\phi)=0$$

从而$\partial f(\theta,\phi)/\partial\phi=0$.

(2) 由于所给出的波函数的渐近形式并非l^2的本征函数，所以我们不可能将上述讨论推广为f不依赖于θ.

(3) 但是，当能量$E\to0$，即$k\to0$时，入射波e^{ikz}几乎只包含$l=0$的分波，其他分波的振幅很小，可以略去. 这时，H 在旋转下的不变性导致l^2守恒，所以出射波也应为l^2的本征值$l=0$的本征态(近似)，于是应有

$$\frac{1}{\sin\theta}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left[\sin\theta\frac{\mathrm{d}f(\theta)}{\mathrm{d}\theta}\right]=0$$

注意到$f(\theta)$必须具有波函数的良好性质，所以

$$\frac{\mathrm{d}f(\theta)}{\mathrm{d}\theta}=0$$

(4) 散射截面的公式为

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}=\left|f(\theta,\phi)\right|^2$$

(5) f的一级 Born 近似公式为

$$f(\theta,\phi)=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}'v(\boldsymbol{r}')\exp(-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}')$$

$$=-\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^\infty \mathrm{d}r'r'v(r')\sin qr',\qquad \text{中心场中}$$

式中，$v(\boldsymbol{r}')$为散射势，而$q=k-k_0$为动量转移量，k, k_0分别为散射前后粒子的动量.

(6) Born 近似的适用范围为相对于粒子的入射能量来说，相互作用势较小.

7.17　粒子在一维势$V(x)$上的散射

题 7.17　考虑一个质量为m的粒子在一维势$V(x)$上的散射. (1) 证明

$$G_E(x)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}k\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}}{E-\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}+\mathrm{i}\varepsilon},\qquad \varepsilon\text{是正无穷小}$$

是能量为E的与时间无关的 Schrödinger 方程在出射波边界条件下的自由粒子 Green 函数. (2) 写出一个沿正x方向的入射波能量本征函数所满足的积分方程. 用此方程，求在一级 Born 近似下势为

$$V(x)=\begin{cases}V_0, & |x|<\dfrac{a}{2}\\[2mm] 0, & |x|>\dfrac{a}{2}\end{cases}$$

的反射概率. 你预计在E取什么范围的值时，所采用近似的准确度较高?

解　(1) 满足与时间无关的 Schrödinger 方程

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+E\right)\psi=V\psi$$

的自由粒子 Green 函数$G_E(x)$，满足

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+E\right)G_E(x)=\delta(x)$$

我们将$G_E(x)$和$\delta(x)$都写成 Fourier 积分的形式

$$G_E(x)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}kf(k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$$

$$\delta(x)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}k\mathrm{e}^{ikx}$$

代入$G_E(x)$满足的方程，有

$$\left(-\frac{\hbar^2k^2}{2m}+E\right)f(k)=1$$

$$f(k)=\frac{1}{E-\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}}$$

由于$f(k)$的奇点在积分路径上，而 Fourier 积分可以理解成复k平面上的积分，我们不妨在$f(k)$的表达式分母中加上一项$\mathrm{i}\varepsilon$，ε为实数. 在完成了$G_E(x)$的积分计算后再令$\varepsilon\to 0$，而ε的正负号则由边界条件决定. 考虑积分

$$G_E(x)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}k\frac{\mathrm{e}^{ikx}}{E-\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}+\mathrm{i}\varepsilon},\qquad \varepsilon>0$$

在$x>0$时，积分可以沿上半平面半径无限大的围道计算，$k_1=\dfrac{(2m)^{1/2}}{\hbar}(E+\mathrm{i}\varepsilon)^{1/2}$为上半平面唯一的奇点. 由留数定理

$$G_E(x)=-\mathrm{i}\frac{m}{\hbar^2k_1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x},\qquad x>0$$

$\varepsilon\to 0$时，$k_1\to k$.

同样，$x<0$时，积分可以沿下半平面的围道计算

$$G_E(x)=-\mathrm{i}\frac{m}{\hbar^2k_1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1x},\qquad x<0$$

于是$G_E(x)$在$x>0$和$x<0$时都代表出射波(如果取$\varepsilon<0$，则得到具有入射波边界条件的解). 所以$G_E(x)$是定态 Schrödinger 方程在出射波边条件下的自由粒子 Green 函数.

(2) 定态 Schrödinger 方程的解满足积分方程

$$\begin{aligned}\psi_E(x)&=\psi^0(x)+G_E(x)*[V(x)\psi_E(x)]\\&=\psi^0(x)+\int_{-\infty}^{\infty}G_E(x-\xi)V(\xi)\psi_E(\xi)\mathrm{d}\xi\end{aligned}$$

式中，$\psi^0(x)$是齐次 Schrödinger 方程

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+E\right)\psi(x)=0$$

的解.

在一级 Born 近似下，我们用入射波函数代换积分方程右边的$\psi(x)$项

$$\begin{aligned}\psi_E(x)&=\mathrm{e}^{ikx}+\int_{-\infty}^{\infty}G_E(x-\xi)V(\xi)\mathrm{e}^{ik\xi}\mathrm{d}\xi\\&=\mathrm{e}^{ikx}+\int_{-\infty}^{x}(-\mathrm{i})\frac{m}{\hbar^2k}\mathrm{e}^{ik(x-\xi)}V(\xi)\mathrm{e}^{ik\xi}\mathrm{d}\xi+\int_{x}^{\infty}(-\mathrm{i})\frac{m}{\hbar^2k}\mathrm{e}^{-ik(x-\xi)}V(\xi)\mathrm{d}\xi\mathrm{e}^{ik\xi}\end{aligned}$$

我们要求$x\to-\infty$时的解的形式，显然积分

$$\int_{-\infty}^{x}(-\mathrm{i})\frac{m}{\hbar^2 k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x-\xi)}V(\xi)\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\xi}\mathrm{d}\xi=0$$

$$\int_{x}^{\infty}(-\mathrm{i})\frac{m}{\hbar^2 k}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\mathrm{e}^{2\mathrm{i}k\xi}V(\xi)\mathrm{d}(\xi)$$

$$=\int_{-a/2}^{a/2}(-\mathrm{i})\frac{m}{\hbar^2 k}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}V_0\mathrm{e}^{2\mathrm{i}k\xi}\mathrm{d}\xi$$

$$=-\mathrm{i}\frac{mV_0}{\hbar^2 k^2}\sin ka\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$$

所以反射概率为

$$R=\frac{m^2V_0^2}{\hbar^4 k^4}\sin^2 ka$$

在能量较高时

$$\left|\int_{-\infty}^{\infty}G_E(x-\xi)V(\xi)\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\xi}\mathrm{d}\xi\right|\ll\left|\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\right|$$

因而用$\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$代替积分方程右边的$\psi(x)$项，近似的准确度较高.

7.18　$V(\boldsymbol{r})=g\delta^3(\boldsymbol{r})$ 散射截面

题 7.18　在 Born 近似下计算一质量为 m 的粒子被势

$$V(\boldsymbol{r})=g\delta^3(\boldsymbol{r})$$

散射的微分截面及总截面.

解

$$f(\theta)=-\frac{1}{4\pi}\cdot\frac{2\mu}{\hbar^2}g\int\exp\left(-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}'\right)\delta(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}'=-\frac{1}{4\pi}\cdot\frac{2\mu}{\hbar^2}g$$

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2=\frac{\mu^2 g^2}{4\pi^2\hbar^4}$$

如各向同性，故总截面为

$$\sigma^{\text{total}}=\frac{\mu^2 g^2}{\pi\hbar^4}$$

7.19　球对称势 $B\delta^3(r-a)$ 对高、低能粒子的微分散射截面

题 7.19　设有一个质量为 m，能量为 E 的粒子在球对称势 $B\delta^3(r-a)$ 上散射，其中 B 和 a 都是常数. (1) 在散射能量很高的情况下，用 Born 近似计算微分散射截面. (2) 在甚低能散射的情形，$\lambda>a$，微分散射截面为何？

解　(1)

$$f=-\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^{\infty}r^2\frac{\sin qr}{qr}B\delta(r-a)\mathrm{d}r$$

$$=-\frac{2m\sin qa}{\hbar^2 q}Ba$$

所以

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\left(\frac{2m\sin qa}{\hbar^2 q}Ba\right)^2$$

(2) 在能量很低的情形，只需考虑 $l=0$ 的分波. 设径向波函数 $R(x)=\chi(r)/r$, $\chi(r)$ 则满足

$$\chi''+\frac{2m}{\hbar^2}[E-B\delta(r-a)]\chi=0$$

其解形式为

$$\begin{cases}\chi=A\sin kr, & r<a\\ \chi=A'\sin(kr+\delta_0), & r>a\end{cases}\qquad k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

利用边界条件

$$\chi(a+0)=\chi(a-0)$$

$$\chi'(a+0)-\chi'(a-0)-\frac{2m}{\hbar^2}B\chi(a)=0$$

可得

$$k\cot(ka+\delta_0)-k\cot ka=\frac{2m}{\hbar^2}B$$

显然 $k\to 0$ 时，δ_0 随 k 趋于 0

$$\delta_0\to\frac{k}{\frac{2m}{\hbar^2}B+\frac{1}{a}}$$

所以

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\frac{1}{k^2}\left|\sin\delta_0 e^{i\delta}\right|\to\left(\frac{1}{\frac{2m}{\hbar^2}B+\frac{1}{a}}\right)^2$$

即散射是各向同性的.

7.20 核子被一重核(散射势为吸引球方势阱)的弹性散射

题 7.20 一个核子被一个重核弹性散射，该重核的效果可表示为一个固定势

$$V(r)=\begin{cases}-V_0, & r<R\\ 0, & r>R\end{cases}$$

式中，V_0 是一个正常数. 计算微分截面到 V_0 的最低级.

解 在 Born 近似下，有

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2=\frac{4\mu^2}{\hbar^4 q^2}\left|\int_0^\infty dr' r' v(r')\sin qr'\right|^2$$

$$=\frac{4\mu^2V_0^2}{\hbar^4q^6}(\sin qR-qR\cos qR)^2$$

式中，$q=2k\sin\frac{\theta}{2}$，k 是入射核子的波数.

7.21 用 Born 近似计算粒子在球对称分布电荷的静电势场中的散射问题

题 7.21 一个质量为 m，电荷为 e，动量为 P 的粒子在一个由球对称电荷分布产生的静电势场中被散射，$\rho(r)\mathrm{d}^3x$ 是体积元 d^3x 中的电荷. 设ρ随 $r\to\infty$ 很快趋于零，并有 $\int\mathrm{d}^3x\rho=0$ 和 $\int\mathrm{d}^3xr^2\rho(r)=A$，$A$ 为已知数. 在第一级 Born 近似下，计算向前散射的微分散射截面(即 $\left.\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right|_{\theta=0}$，其中$\theta$是散射角).

解 考虑 Born 近似，有

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}=\frac{m^2e^2}{4\pi^2\hbar^4}\left|\int U(r)\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3x\right|^2$$

式中，$\boldsymbol{q}=\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'$，$q=2k\sin\frac{\theta}{2}=\frac{2p}{\hbar}\sin\frac{\theta}{2}$.

$U(r)$ 是静电 Coulomb 势，满足 Poisson 方程

$$\Delta U=-4\pi\rho(r)$$

作 Fourier 变换

$$F(q)\equiv\int\rho(r)\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3x$$

则

$$\int U(r)\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3x=\frac{4\pi}{q^2}F(q)$$

于是有

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}=\frac{m^2e^2}{4\pi^2\hbar^4}\cdot\frac{(4\pi)^2}{q^4}|F(q)|^2=\frac{4m^2e^2}{\hbar^4q^4}|F(q)|^2$$

在向前散射时，θ很小，q 很小，于是

$$F(q)=\int\rho(r)\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3x=\int\rho(r)\left[1+\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}+\frac{1}{2!}(\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r})^2+\cdots\right]\mathrm{d}^3x$$

$$=\int\rho(r)\mathrm{d}^3x-\frac{1}{2!}\int\rho(r)(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r})^2\mathrm{d}^3x$$

$$=-\frac{1}{6}q^2\int\rho(r)r^2\mathrm{d}^3x=-\frac{Aq^2}{6}$$

$$\left.\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right|_{\theta=0}=\frac{A^2m^2e^2}{9\hbar^4}$$

7.22 用 Born 近似计算粒子在 $V = Ae^{-r^2/a^2}$ 中的散射截面

题 7.22 一个质量为 m 的粒子，在排斥势

$$V = Ae^{-r^2/a^2}$$

中运动，用 Born 近似求出微分散射截面，确定到差一个相乘的常数.

解

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^{\infty} \mathrm{d}r rV(r)\sin(qr)$$

式中，$q = 2k\sin\theta/2$, $\hbar k$ 为入射粒子动量.

$$\begin{aligned}
f(\theta) &= -\frac{2mA}{\hbar^2 q}\int_0^{\infty} \mathrm{d}r r\mathrm{e}^{-r^2/a^2}\sin(qr) = -\frac{mA}{\hbar^2 q}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}r r\mathrm{e}^{-r^2/a^2}\sin(qr) \\
&= \frac{mAa^2}{2\hbar^2 q}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}r\left(\mathrm{e}^{-r^2/a^2}\right)'\sin(qr) = -\frac{mAa^2}{2\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}r\mathrm{e}^{-r^2/a^2}\cos(qr) \\
&= -\frac{mAa^3}{2\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\left(\frac{r}{a}\right)\mathrm{e}^{-(r/a)^2}\cos\left(qa\frac{r}{a}\right) = -\frac{mAa^3}{2\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}r\mathrm{e}^{-r^2}\cos(qar) \\
&= -\frac{mAa^3}{4\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}r\left\{\exp\left[-\left(r-\frac{\mathrm{i}qa}{2}\right)^2\right] + \exp\left[-\left(r+\frac{\mathrm{i}qa}{2}\right)^2\right]\right\}\mathrm{e}^{-q^2a^2/4} \\
&= -\frac{mAa^3}{2\hbar^2}\sqrt{\pi}\mathrm{e}^{-q^2a^2/4}
\end{aligned}$$

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{m^2A^2a^6}{4\hbar^4}\pi\mathrm{e}^{-q^2a^2/2}$$

7.23 用 Born 近似计算粒子在球方势阱中的散射截面

题 7.23 一个非相对论粒子被如下球方势阱散射.

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r < R \qquad (V_0 > 0) \\ 0, & r > R \end{cases}$$

(1) 假定轰击能量足够高，用 Born 近似计算散射截面(不必归一化)，并画出角分布的形状，指出角度单位. (2) 如何用这个结果来测量 R? (3) 假定 Born 近似是有效的，为使散射对于 R 敏感，能量必须大致要多高? 设粒子是质子

$$R = 5\times 10^{-13}\mathrm{cm}$$

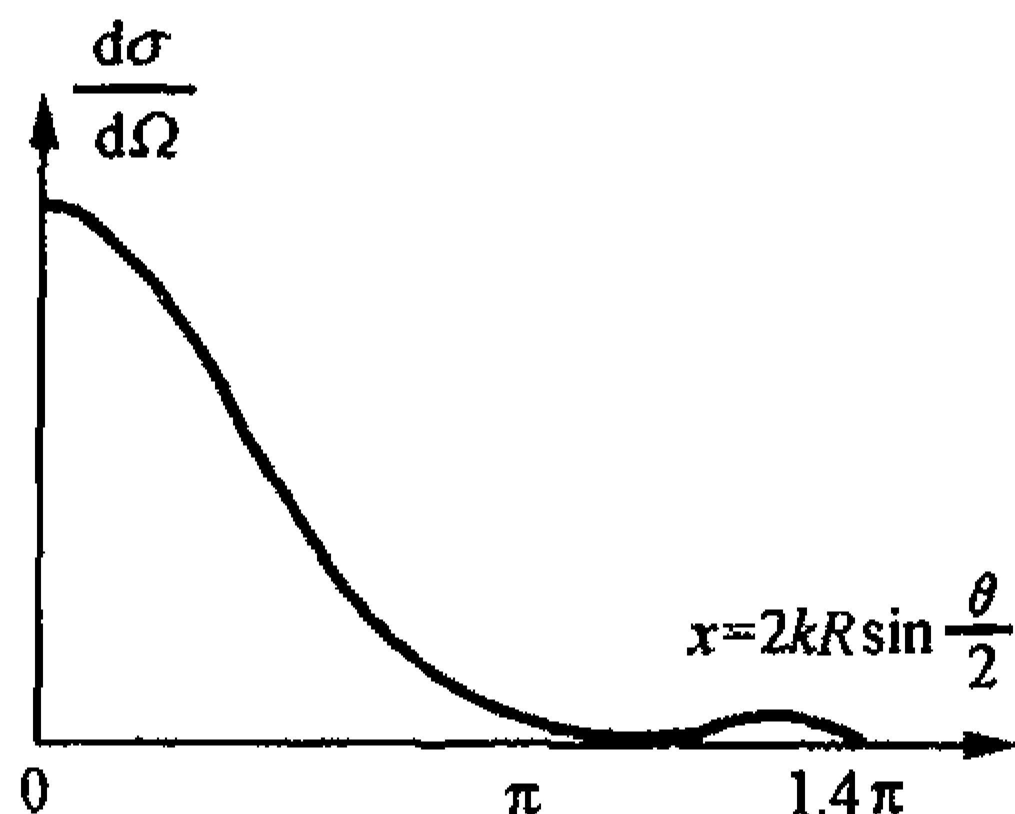
解 (1)

$$\begin{aligned}
f(\theta) &\propto \frac{-1}{q}\int_0^{\infty} rV(r)\sin qr\mathrm{d}r \\
&= \frac{V_0}{q}\int_0^{R} r\sin qr\mathrm{d}r = \frac{V_0}{q^3}(\sin qR - qR\cos qR)
\end{aligned}$$

故得

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} \propto \left(\frac{\sin x - x\cos x}{x^3}\right)^2$$

式中，$x = qR = 2kR\sin\dfrac{\theta}{2}$. 角分布如题图 7.23 所示.



题图 7.23

(2) 由角分布公式知，$\dfrac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}$ 的第一个零点是超越方程

$$x = \tan x$$

的第一个解，这个解约为 1.4π. 代入 x 的公式

$$R = \frac{1.4\pi}{2k\sin\dfrac{\theta_1}{2}}$$

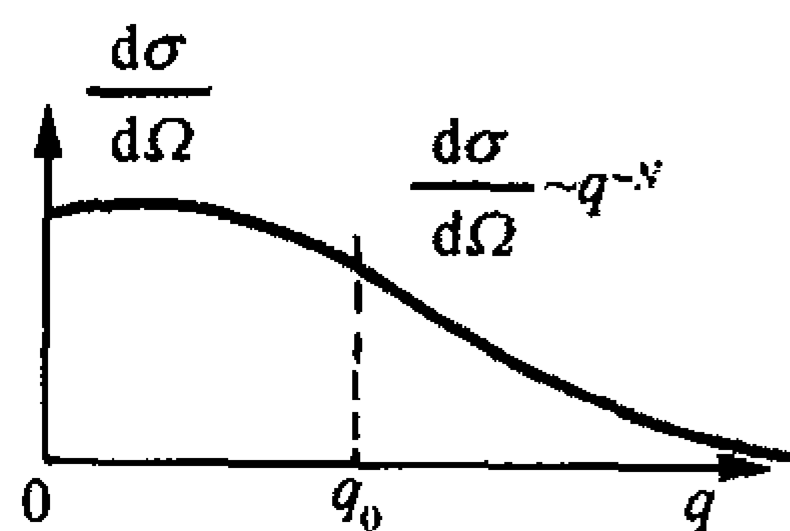
式中，θ_1 是由实验测得的 $\dfrac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}=0$ 的最小 θ 角.

(3) 为了能够由 $\dfrac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}$ 零点测量得出 R，必须要求 x 的最大值($2kR$)大于 1.4π，以使零点存在. 于是得

$$E > \frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{p}}}\left(\frac{1.4\pi}{2R}\right)^2 = \frac{(\hbar c)^2(1.4\pi)^2}{2(m_{\mathrm{p}}c^2)(2R)^2} = 4.0\mathrm{MeV}$$

7.24 已知散射截面曲线 $\dfrac{\mathrm{d}\sigma(\theta)}{\mathrm{d}\Omega}$ 回答散射势的力程与行为

题 7.24 某些中心势的弹性散射可合理地用一级 Born 近似来计算. 实验结果给出下列以 $q=|\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}|$(动量转移量)为变量的散射截面曲线. 如题图 7.24 中给出的参数回答：(1) 势能 V 的近似力程(即空间扩展)为多大(提示：对小 q 展开 Born 近似公式)？ (2) 在小距离上势 V 的行为如何？



题图 7.24

解 (1) Born 近似公式为

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int \mathrm{d}r rV(r)\sin qr$$

$$f(0) \approx -\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^R \mathrm{d}r r^2 V(r) = -\frac{2m}{3\hbar^2}R^3\bar{V}$$

式中，$\bar{V}$ 是在有效力程 R 内的平均值. 另外对小的 q_0 有

$$f(q_0) = -\frac{2m}{\hbar^2 q_0}\int \mathrm{d}r rV(r)\left(q_0 r - \frac{1}{6}q_0^3 r^3\right)$$

$$\approx f(0) + \frac{mq_0^2}{15\hbar^2}R^5\bar{V} = f(0) - \frac{q_0^2}{10}R^2 f(0)$$

于是可得力程的近似值公式

$$R = \sqrt{\frac{10}{q_0^2|f(0)|}\left[|f(0)| - |f(q_0)|\right]}$$

式中，$|f(q_0)|$ 是对某一小 q_0 测得的 $\sqrt{\frac{d\sigma}{d\Omega}}\Big|_{q_0}$，$|f(0)|$ 为在一组小 q_0 处测得的一组微分截面根号的外推(至 $q=0$)值. 由此式可根据实测数据推算有效(等效)力程.

(2) 注意到在大 q 下散射截面的行为，可知这时 Born 积分主要来源于 $qr \leqslant \pi$ 范围内的贡献，而在此之外由于正弦函数的振荡性及有界性，贡献几乎为零. 于是只需对小范围内的 r 积分即可.

设在小距离上，$V(r) \sim r^n$ (之所以这样假设，可从下面运算中看出)于是

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2}\int \mathrm{d}r r^2 V(r)\frac{\sin qr}{qr}$$

$$\approx -\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^x \mathrm{d}(qr)(qr)^2 V(qr)\frac{\sin qr}{qr}q^{-(3+n)}$$

$$= \frac{1}{q^{3+n}}\left[-\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\pi \mathrm{d}x x^2 V(x)\frac{\sin x}{x}\right]$$

与散射截面行为相比较，可知应有

$$\frac{N}{2} = 3 + n$$

因此，小距离范围上 V 的行为是

$$V \sim r^{(N/2-3)}$$

7.25 用 Born 近似计算散射势 $V = \frac{qQ}{r}\mathrm{e}^{-\alpha r}$ 的散射截面

题 7.25 一电荷为 q 的粒子被一个核荷为 Q 的原子散射该粒子势能 V 的一个简便模型为

$$V = \frac{qQ}{r}\mathrm{e}^{-\alpha r}$$

式中，α^{-1} 表示原子中电子的屏蔽长度. (1) 用 Born 近似

$$f = -\frac{1}{4\pi}\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Delta k\cdot r}\frac{2m}{\hbar^2}V(r)\mathrm{d}^3 r$$

计算散射截面 σ. (2) 怎样依赖于核荷 Z?

解 (1) 作为弹性散射，$|\boldsymbol{k}| = |\boldsymbol{k}_0|$

$$|\Delta k| = |\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_0| = 2k\sin\frac{\theta}{2}$$

所以

$$\begin{aligned}
f &= -\frac{1}{4\pi}\int e^{-i\Delta k\cdot r}\frac{2m}{\hbar^2}V(r)d^3r \\
&= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int_0^\infty dr\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^\pi e^{-i\Delta kr\cos\theta'}V(r)r^2\sin\theta' d\theta \\
&= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\times 2\pi\int_0^\infty r\frac{1}{-i\Delta k}\frac{q\theta}{r}e^{-\alpha r}2i\sin(\Delta kr)dr \\
&= -\frac{2mq\theta}{\Delta k\hbar^2}\int_0^\infty e^{-\alpha r}\sin(\Delta kr)dr \\
&= -\frac{2mqQ}{\hbar^2}\frac{1}{\alpha^2+\Delta k^2}
\end{aligned}$$

$$\sigma = |f(\theta)|^2 = \frac{4m^2q^2Q^2}{\hbar^4\left[\alpha^2+4k^2\sin^2(\theta/2)\right]^2}$$

(2) 由 Thomas-Fermi 近似，当 Z 较大时，在原子内静电场 $\phi(r)$ 变化不大的范围内已有足够多的电子，这些电子可看成自由的 Fermi 气体.

电子束缚在原子内，故其能量不大于无穷远处能量值 $E(\infty)=0$，于是 r 处可能的最大动量 $p_{\max}$ 满足

$$\frac{1}{2m}p_{\max}^2(r) - e\phi(r) = 0$$

而 r 处的 Fermi 动量

$$p_f(r) = p_{\max}(r) = [2me\phi(r)]^{1/2} \tag{1}$$

又对于自由电子 Fermi 气体有

$$p_f = \hbar(3\pi^2 n)^{1/3} \tag{2}$$

式中，n 为电子密度.

联立式(1)和式(2)，得

$$\begin{aligned}
n(r) &= \frac{1}{3\pi^2\hbar^3}[2me\phi(r)]^{3/2} \\
&= \frac{1}{3\pi^2\hbar^3}\left(2mZe^2\frac{1}{r}e^{-\alpha r}\right)^{3/2}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Z &= \int n dV = 4\pi\int_0^\infty n(r)r^2 dr \\
&= \frac{4}{3\pi\hbar^2}(2mZe^2)^{3/2}\int_0^\infty e^{-\frac{3}{2}\alpha r}r^{1/2}dr \\
&= \frac{2}{3\sqrt{\pi}\hbar^2}\left(\frac{4me^2}{3}\right)^{3/2}\frac{Z^{3/2}}{\alpha^{3/2}}
\end{aligned}$$

所以

$$\alpha=\frac{4me^2}{3\hbar^2}\left(\frac{4}{9\pi}\right)^{1/3}Z^{1/3}=\frac{4}{3}\left(\frac{4}{9\pi}\right)^{1/3}\frac{1}{a_0}Z^{1/3}$$

式中，$a_0=\hbar^2/me^2$ 为 Bohr 半径.

7.26 用 Born 近似计算 $V(r)=V_0e^{-r/a}$ 下的散射截面

题 7.26 一个质量为 m 的粒子被势场 $V(r)=V_0e^{-r/a}$ 所散射. (1) 在一级 Born 近似下计算微分散射截面，画出小 k 和大 k 下的角度依赖关系，这里 k 是被散射粒子的波数. 在什么 k 值时散射开始显著地各向异性？将这个估计与基于角动量基础理论得到的值比较. (2) Born 近似的判据是

$$\left|\frac{\Delta\psi^{(1)}(0)}{\psi^{(0)}(0)}\right|\ll 1$$

这里 $\Delta\psi^{(1)}$ 是对入射平面波的一级修正. 在目前这个势场情况下具体算出这个判据，你的结论中的小 k 的极限是多少？大 k 极限对于这个判据来说在势的强度上的限制如何？

解 (1) Born 近似给出

$$\begin{aligned}f(\theta)&=-\frac{2m}{\hbar^2q}\int_0^\infty dr'r'V(r')\sin qr'\\&=-\frac{2mV_0}{\hbar^2q}\int_0^\infty dr'r'\sin qr'e^{-r'/a}\\&=-\frac{4mV_0a^3}{\hbar^2(1+q^2a^2)^2}\end{aligned}$$

式中，$q=2k\sin(\theta/2)$. 于是

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2=\frac{16m^2V_0^2a^6}{\hbar^4\left(1+4k^2a^2\sin^2\dfrac{\theta}{2}\right)^4}$$

当 $ka\sim1$ 时，$\sigma(\theta)$ 显著地各向异性.

由角动量理论分析，只考虑 s 波散射的条件

$$a\hbar k\leqslant\hbar\Rightarrow ka\leqslant1$$

当 $ka\sim1$ 时即显示出各向异性，可见两者相符.

(2) 波函数精确到一级时为

$$\psi(r)=e^{ikz}-\frac{1}{4\pi}\int\frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|}\frac{2m}{\hbar^2}V(r')e^{ikz'}dr'$$

所以

$$\left|\frac{\Delta\psi^{(1)}(0)}{\psi^{(0)}(0)}\right|=\left|\frac{V_0}{4\pi}\int\frac{e^{ikr'}}{r'}\frac{2m}{\hbar^2}e^{-r'/a+ikz'}dV'\right|$$

$$=\left|\frac{mV_0}{\hbar^2}\int r'\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr'-r'/a+\mathrm{i}kr'\cos\theta'}\sin\theta'\mathrm{d}\theta\mathrm{d}r'\right|$$

$$=\frac{2m|V_0|a^2\sqrt{1+4k^2a^2}}{\hbar^2(4k^2a^2+1)}=\frac{2m|V_0|a^2}{\hbar^2\sqrt{1+4k^2a^2}}$$

利用给出的判据，即有

$$\frac{2m|V_0|a^2}{\hbar^2\sqrt{1+4k^2a^2}}\ll 1$$

小 k 极限下，$ka\ll 1$，结果为

$$\frac{2m|V_0|a^2}{\hbar^2}\ll 1,\qquad |V_0|\ll\frac{\hbar^2}{ma^2}$$

即势足够弱，足够局域.

大 k 极限下，$ka\gg 1$，结果为

$$\frac{m|V_0|a}{\hbar^2 k}\ll 1,\qquad |V_0|\ll\frac{\hbar^2 k}{ma}$$

即入射粒子能量足够高.

从上述推导过程中可看出，大 k 情况下对势的限制弱些.

7.27　用 Born 近似计算 $V(r)=\beta\dfrac{\mathrm{e}^{-\alpha r}}{r}$ 下的散射截面

题 7.27　对于相互作用 $V(r)=\beta\dfrac{\mathrm{e}^{-\alpha r}}{r}$，用 Born 近似求出微分散射截面. 有效性条件是什么？提出一个或更多的这一模型的物理应用.

解

$$f(\theta)=-\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^\infty \mathrm{d}r'r'V(r')\sin qr'$$

$$=-\frac{2m\beta}{\hbar^2 q}\int_0^\infty \mathrm{d}r\mathrm{e}^{-\alpha r}\sin qr=\frac{-2m\beta}{\hbar^2(q^2+\alpha^2)}$$

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2=\frac{4m^2\beta^2}{\hbar^4(q^2+\alpha^2)^2},\qquad q=2k\sin\frac{\theta}{2}$$

Born 散射公式是将势场作为微扰而得出的，即有

$$|\psi_1|\ll|\psi_0|$$

这里 $\psi(\boldsymbol{r})=\psi_0(\boldsymbol{r})+\psi_1(\boldsymbol{r})$，而 $\psi_0(\boldsymbol{r})=\mathrm{e}^{ikz}$

$$\psi_1(r)\approx-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}V(\boldsymbol{r}')\psi_0(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3x'$$

分两种情况讨论. 设 a 为势不显著为零的空间尺度的数量级.

(i) 势足够弱或势场足够局域.

$$|\psi_1| \leqslant \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int\frac{|V(\boldsymbol{r}')|}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}|\psi_0(\boldsymbol{r}')|\mathrm{d}^3x' \sim \frac{m|V|a^2|\psi_0|}{\hbar^2} \leqslant |\psi_0|$$

我们就得条件

$$|V| \ll \frac{\hbar^2}{ma^2}$$

即势足够弱或势场足够局域时，Born 近似成立. 注意，本条件不包含入射粒子速度，因此若势场满足本条件，则 Born 近似对一切能量的入射粒子均成立.

(ii) 高能散射，$ka \gg 1$, $\psi_0 = \mathrm{e}^{ikz}$.

考虑ψ_1满足的方程

$$\nabla^2\psi_1 + k^2\psi_1 = \frac{2m}{\hbar^2}Ve^{ikz}$$

令$\psi_1 = \mathrm{e}^{ikz}f$，由于假定$k$值很大，在$\nabla^2\psi_1$中我们只保留$\mathrm{e}^{ikz}$因子经过一次或两次微商后所得的项. 因此可得

$$\frac{\partial f}{\partial z} = -\frac{\mathrm{i}m}{\hbar^2 k}V$$

$$\psi_1 = \mathrm{e}^{ikz}f = -\frac{\mathrm{i}m}{\hbar^2 k}\mathrm{e}^{ikz}\int V\mathrm{d}z$$

$$|\psi_1| \sim \frac{m|V|a}{\hbar^2 k} \ll |\psi_0| = 1$$

$$|V| \ll \frac{\hbar^2 k}{ma} = \frac{\hbar v}{a}$$

即入射粒子速度足够高时，Born 近似总可以成立.

从以上结果还可以看出，低能时一个势场若可作微扰来处理，那么在高能时该势场一定仍然可作微扰来处理. 反之则不成立.

本题$a = 1/\alpha$, $V(a) = \beta\alpha$，有效性条件化为：

(i) $|\beta| \ll \dfrac{\alpha\hbar^2}{m}$;

(ii) $|\beta| \ll \hbar v = \dfrac{\hbar^2 k}{m}$, $k = \sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$.

上述相互作用势的模型 1934 年由 Yukawa 用于原子核. Yukawa 认为核子之间的作用势与此模型相同，较好地解释了强作用力的短程性.

7.28 求证球对称势$V(r) = \dfrac{\beta}{r}\mathrm{e}^{-\gamma r}$下的微分散射截面，并推导 Rutherford α 粒子散射公式

题 7.28 (1) 粒子入射球对称势$V(r) = \dfrac{\beta}{r}\mathrm{e}^{-\gamma r}$，这里$\beta$和$\gamma$是常数. 证明，在 Born 近似下微分散射截面为

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}=\left[\frac{2m\beta}{\hbar^2(q^2+r^2)}\right]^2$$

式中，$q=|\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'|$，$\boldsymbol{k}$，$\boldsymbol{k}'$分别为入射粒子与散射粒子的波矢. (2) 用以上结果导出α粒子散射的 Rutherford 公式，即对于能量为E的α粒子射向原子序数为Z的核时，沿θ方向的微分散射截面为

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}=\left[\frac{Ze^2}{8\pi\varepsilon_0 E\sin^2(\theta/2)}\right]^2$$

解　(1) 由 Born 近似给出散射振幅

$$\begin{aligned}f(\theta)&=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int V(r)\exp(-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r})\mathrm{d}V\\&=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int_0^\infty V(r)r^2\mathrm{d}r\iint \mathrm{e}^{-\mathrm{i}qr\cos\theta}\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi\end{aligned}\tag{1}$$

式中，θ为$\boldsymbol{q}$与$\boldsymbol{r}$的夹角(设$\vec{q}$沿极轴方向). 由于

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\exp(\mathrm{i}qr\cos\theta)\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi=\frac{4\pi}{qr}\sin qr\tag{2}$$

将式(2)代入式(1)，并将$V(r)$代入，可得

$$f(\theta)=-\frac{2m\pi}{q\hbar^2}\int_0^\infty \sin qr\mathrm{e}^{-\gamma r}\mathrm{d}r\tag{3}$$

对式(3)积分后，易得最后结果为

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}=|f(\theta)|^2=\left[\frac{2m\beta}{\hbar^2(q^2+r^2)}\right]^2\tag{4}$$

(2) 因为α粒子带Ze的正电，核电荷为Ze，故静电势为$V(r)=\frac{2Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{r}$，与(1)中的$V(r)$相比较，可知

$$\beta=\frac{2Ze^2}{4\pi\varepsilon_0},\qquad r=0\tag{5}$$

将式(5)代入式(4)，给出

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}=\left(\frac{mZe^2}{\pi\varepsilon_0\hbar^2q^2}\right)^2\tag{6}$$

由于是弹性散射，故入射粒子与散射粒子的动量大小不变，即$p=\hbar k=p'=\hbar k'$. 这时有

$$q=|\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'|=2k\sin\frac{\theta}{2}\tag{7}$$

另外考虑到α粒子能量E为

$$E=\frac{p^2}{2m}=\frac{\hbar^2k^2}{2m}\tag{8}$$

由式(7)，式(8)可得

$$\hbar^2 q^2 = 8mE\sin^2\frac{\theta}{2} \tag{9}$$

将式(9)代入式(6)即可得所求的结果.

讨论 本题获得 Rutherford 公式，所用的方法是不严格的. 因为上题中式(1)只适用于散射势函数 $V(r)$当 $r\to\infty$ 时，趋于零的速度比 $\frac{1}{r}$ 还快，即短程散射势的情况. 这对于核作用力及受电子屏蔽的原子核的静电 Coulomb 力是适用的，但对纯 Coulomb 力则不适用. Coulomb 力的力程足够长，以至于当 $r\to\infty$ 时入射粒子仍处于势场中，不能视为自由粒子，波函数不能用 e^{ikz} 表示. 长程势的散射问题严格解法更为复杂，这里不准备涉及此问题，但庆幸的是对 Rutherford 公式的推导结果与本题是相同的.

Rutherford 在 1913 年用经典力学方法获得了与量子力学推导结果同样的公式，一般来说公式中不包含普朗克常量 $\hbar$ 的量子力学结果往往也能用经典力学方法获得.

7.29 求解金箔对 α 粒子的散射，由此求金的原子序数

题 7.29 (1) 假定一束窄的 α 粒子束正入射到一块很薄的金箔上，沿与入射方向成 θ 角的散射粒子在被一探测器 s 接收，探测器相对原点 C(α 粒子入射金箔的位置中心)所张角为 $\mathrm{d}\Omega$. 试证明，被 s 探射到的散射粒子数占入射粒子的比例是

$$f = \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} n d \mathrm{d}\Omega$$

这里 $\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}$ 是单核的微分散射截面，n 是金箔中单位体积的核数目，d 是箔厚. 箔厚 d 足够小，以至于可以认为在箔内任何深度的入射粒子流密度与入射前相同. (2) α 粒子散射的系统测量最早由 Geiger 和 Marsdon 在 1913 年完成. 他们所用的源是 ^{214}Po，发射的 α 粒子能量 $E = 7.68\text{MeV}$，探测器面积 1mm^2，离散射中心 C 点距离 10mm，箔厚 $d = 2.1\times10^{-7}\,\text{m}$，$\theta = 45°$，他们发现 $f = 3.7\times10^{-7}$. (金的原子质量 W_A 为 197，金箔密度为 $19300\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$)试从这些测量结果中求金的原子序数.

解 (1) 由微分散射截面的定义可知，每秒沿 θ 方向被单核散射到立体角 $\mathrm{d}\Omega$ 内的散射粒子数为 $\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} J_i \mathrm{d}\Omega$，这里 J_i 为入射粒子流密度. 如果粒子打在金箔上一块面积为 A 厚度为 d 的小区域上，则在入射粒子束拥有 nAd 个原子核，它们都独立地引起入射粒子散射，这样每秒钟向 $\mathrm{d}\Omega$ 角内散射的总粒子数为

$$n_s = \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} J_i \mathrm{d}\Omega n \mathrm{A} d \tag{1}$$

而每秒钟射到金箔上的入射粒子数 n_i 为 $J_i A$，故两者比例为

$$f = \frac{n_s}{n_i} = \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} n d \mathrm{d}\Omega \tag{2}$$

式(2)的结果用到对所有核而言 J_i 不变，这只有 d 很小时近似成立，否则 J_i 将指数衰减.

(2) 将 $E = 7.68\text{MeV} = 7.68\times1.602\times10^{-13}\text{J}$ 和 $\theta = 45°$ 代入题 7.28(2)的结果中，可得

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=4.10\times10^{-31}\times Z^2(\mathrm{m}^2) \tag{3}$$

单位体积的金原子数为$n=10^3N_A\rho/W_A$，其中N_A为常数. 将$\rho=19300\mathrm{kg\cdot m^{-3}}$代入，可知

$$n=5.90\times10^{28}\mathrm{m}^{-3} \tag{4}$$

探测器所张的立体角$d\Omega=s/r^2$，其中s是探测器的面积，r为它到C点的距离，由题目条件易算出

$$d\Omega=10^{-2}\text{弧度} \tag{5}$$

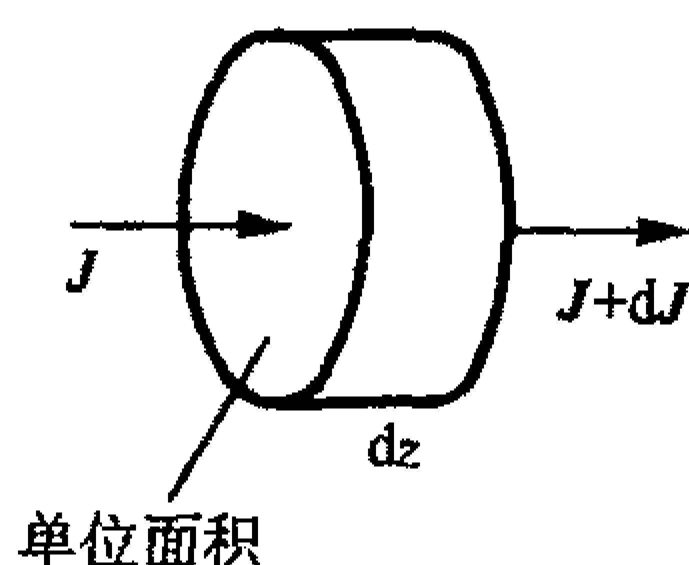
将式(3)、式(4)和式(5)代入式(2)，结果可算出$Z=85$，这与精确的金的原子序数79很接近.

7.30　求解中子束在20℃干燥空气中行进1m后的衰减

题 7.30　氮和氧原子对能量为25MeV的中子的总散射截面和吸收截面分别为

	σ_t	σ_a	
氮原子:	11.5	1.8	(单位: $10^{-28}\mathrm{m}^2$)
氧原子:	4.2	0.0	

估计这样能量的中子束在温度为20℃的干燥空气中行进1m后的衰减(20℃时空气密度为$1.20\mathrm{kg\cdot m^{-3}}$).



题图 7.30

解　散射截面σ_t与吸收截面σ_a分别表示每秒散射的总粒子数与吸收的粒子数与入射粒子的流密度之比. 因此，每秒钟从入射粒子流失去的粒子数与入射粒子流密度之比可视为总截面$\sigma_{总}=\sigma_t+\sigma_a$.

设中子束沿z轴方向运动，流经一单位横截面积厚度为d的圆柱型空气柱(见题图 7.30)，入射时流密度为J，流出柱体时流密度为$J+dJ$. 如果此空气柱中包含的氮原子和氧原子数密度分别是n_N和n_O，又考虑到空气柱的体积为$dz\cdot1$，容易计算出经过空气柱后，流密度的变化dJ为

$$-dJ=(\sigma_{N总}n_N+\sigma_{O总}n_O)Jdz=\alpha Jdz \tag{1}$$

式中，$\sigma_{N总}$，$\sigma_{O总}$分别表示氮原子和氧原子的总截面，$\alpha=\sigma_{N总}n_N+\sigma_{O总}n_O$. 对式(1)积分易得

$$J=Je^{-\alpha z}$$

假设空气中氮与氧的比例为$4:1$，即$n_N=4n_O$则空气的密度为

$$\rho=\left[(4\times14)+(1\times16)\right]\frac{n_O}{10^3N_A} \tag{2}$$

式中，N_A为阿伏加德罗常数($N_A=6.02\times10^{23}\mathrm{mol^{-1}}$). 在已知$\rho=1.20\mathrm{kg\cdot m^{-3}}$的条件下，由式(2)可算出

$$n_O=1.003\times10^{25}\mathrm{m}^{-3}$$

由上式和题目所给条件易求出

$$\alpha=\sigma_{N总}n_N+\sigma_{O总}n_O=0.057\mathrm{m}^{-1}$$

当$z=1\text{m}$时，$e^{-\alpha z}=0.944$，即每经过1m，中子束的衰减为5.6%.

7.31 中子束被球对称方势阱散射的散射长度与总散射截面

题 7.31 质量为m，能量为E的中子流入射一球对称方阱，$V(r)=\begin{cases}-V_0, & r\leqslant a\\ 0, & r>a\end{cases}$(此势可表示中子与散射核之间的核力). 如果中子速度$v\ll\dfrac{\hbar}{ma}$，证明：

(1) 散射是球对称的.

(2) s波的相移δ满足$j\tan(ka+\delta)=k\tan ja$，其中$k^2=2mE/\hbar^2$，$j^2=2m(V_0+E)/\hbar^2$.

(3) 散射长度为$b=a\left(1-\dfrac{\tan y}{y}\right)$，这里$y=(2mV_0)^{1/2}a/\hbar$.

(4) 当E趋于零时的总散射截面.

解 (1) 中子波长$\lambda=h/mv$，所以如果

$$v=\frac{h}{m\lambda}\ll\frac{h}{ma}$$

则$\lambda\gg a$，即粒子波长比势的范围大的多，这种条件下只有粒子的 s 分波被散射，这意味着散射是球对称的.

(2) s分波波函数$u(r)$只依赖于r，可以写成

$$u(r)=\frac{x(r)}{r}$$

式中，$x(r)$满足方程

$$\frac{d^2x}{dr^2}+\left[k^2-\frac{2m}{\hbar^2}V(r)\right]x=0$$

将题目中的$V(r)$代入上式有

$$\frac{d^2x}{dr^2}+j^2x=0,\quad r\leqslant a$$

$$\frac{d^2x}{dr^2}+k^2x=0,\quad r>a$$

考虑到$u(r)|_{r=0}$二有限的边界条件$(u(r)|_{r=0}=0)$，上式的解为

$$x(r)=A\sin jr,\qquad r\leqslant a \tag{1}$$

$$x(r)=B\sin(kr+\delta),\qquad r>a \tag{2}$$

式中，A，B，δ为待定常数. 将式(1)、式(2)代入$r=a$的边界连续性条件，可得

$$A\sin ja=B\sin(ka+\delta)$$

$$jA\cos ja=kB\cos(ka+\delta)$$

上面两式相除，有

$$j\tan(ka+\delta)=k\tan ja \tag{3}$$

(3) 散射长度的定义是

$$b = -\lim_{k\to 0}\frac{\tan\delta}{k} \tag{4}$$

由式(3)可知

$$k\tan ja = j\frac{\tan ka+\tan\delta}{1-\tan ka\tan ja}$$

由此可得

$$\tan\delta = \frac{k\tan ja - j\tan ka}{j + k\tan ka\tan ja} \tag{5}$$

当$k\to 0$时，$\tan ka\to ka$，$ja\to(zmV_0)^{1/2}a/\hbar = y$. 而$k\tan ka\tan ja$趋向于$k^2a\tan ja$，与$j$相比此项可以忽略，于是式(5)变为

$$\tan\delta \to \frac{k\tan ja - kja}{j} \to ak\frac{\tan y - y}{y} \tag{6}$$

将式(6)代入式(4)，可得

$$b = a\left(1-\frac{\tan y}{y}\right)$$

(4) 由于只考虑 s 分波散射，所以有

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik}\left[\exp(2i\delta)-1\right] = \exp(i\delta)\frac{\sin\delta}{k} \tag{7}$$

于是微分散射截面为

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \frac{\sin^2\delta}{k^2} \tag{8}$$

当$k\to 0$时，$\sin\delta\to\tan\delta\to 0$，由式(4)，式(7)，式(8)可知

$$f(\theta)\to -b,\qquad \frac{d\sigma}{d\Omega}\to b^2$$

由于$\frac{d\sigma}{d\Omega}$与方向无关，故总散射截面为

$$\sigma_t = 4\pi b^2 = 4\pi a^2\left(1-\frac{\tan y}{y}\right)^2$$

7.32　材料的折射率与全反射临界角

题 7.32　(1) 证明在球对称势$V(r) = g\delta(\boldsymbol{r})$(这里$g$为常数，$\delta(\boldsymbol{r})$为三维$\delta$函数)中，在 Born 近似下，散射振幅为

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}g$$

(2) 若用δ势来模拟散射长度为b的核对势中子的散射势，求g的表达式. (3) 波长为λ的热中子入射一块材料厚片，设其中的核具有相等的散射长度，证明厚片的行为像一块折射率为n的介质，n为

$$n = 1-\frac{1}{2\pi}Nb\lambda^2$$

这里 N 是单位体积的核数. (4) 证明若 $b>0$，则介质表面全反射的临界角 $r_c=\lambda(Nb/\pi)^{1/2}$.

解 (1) Born 近似下的散射振幅是

$$f(\theta)=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int V(r)\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})\mathrm{d}V$$

将 $V(r)=g\delta(\boldsymbol{r})$ 代入上式易得

$$f(\theta)=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}g \tag{1}$$

(2) 因为 g 是常数，所以 $f(\theta)$ 也是常数，这个常数对于核的热中子散射来说应为 $-b$(b 是散射长度). 所以令式(1)等于 $-b$，即可得到

$$g=\frac{2\pi\hbar^2 b}{m_{\mathrm{n}}}$$

这里 m_{n} 是中子质量.

(3) 设中子在真空中的波数为 k_0，在介质中的波数为 k，则介质的折射率 $n=k/k_0$. 下面先求材料中由核引起的平均势能. 设每个核有一个 δ 势，这些势函数对整个体积求积分后再用整个体积除，容易得到

$$\bar{V}=Ng=N\frac{2\pi\hbar^2}{m_{\mathrm{n}}}b \tag{2}$$

这里 N 是核的密度.

中子在真空中的能量为 E(全面是动能)，在介质中的动能是 $E-\bar{V}$，这样有

$$k_0^2=\frac{2m_{\mathrm{n}}}{\hbar^2}E,\qquad k^2=\frac{2m_{\mathrm{n}}}{\hbar^2}(E-\bar{V}) \tag{3}$$

由此可知

$$n=\frac{k}{k_0}=\left(1-\frac{\bar{V}}{E}\right)^{1/2}$$

由式(2)和式(3)，有

$$\frac{\bar{V}}{E}=\frac{4\pi Nb}{k_0^2}=\frac{Nb\lambda^2}{\pi}$$

这里 $\lambda=2\pi/k_0$ 是中子在真空中的波长.

因为 $N\sim 1/d^3$，d 是散射物质中原子之间的距离(数量级 $\sim 10^{-10}\mathrm{m}$). 热中子波长也具有相同的量级，而散射长度 b 的量级为 10^{-14}m，所以

$$Nb\lambda^2\sim\frac{b}{d}\sim 10^{-4}$$

所以 $\bar{V}\ll E$，因而有

$$n=\left(1-\frac{\bar{V}}{E}\right)^{1/2}\approx 1-\frac{\bar{V}}{2E}=1-\frac{Nb\lambda^2}{2\pi}$$

(4) 因为 $Nb\lambda^2\ll 1$，所以当 $b>0$ 时，折射率 n 比 1 稍小一点点，所以从真空入射时的临界掠射角 r_c 也很小，它满足公式

$$n = \frac{\sin i}{\sin r} = \frac{\cos r_c}{1}$$

当 r_c 很小时有

$$\cos r_c \approx 1 - \frac{1}{2} r_c^2 \approx n = 1 - \frac{Nb\lambda^2}{2\pi}$$

即有

$$r_c = \left(\frac{Nb}{\pi} \right)^{1/2} \lambda$$

讨论　(1) 散射问题中 Born 近似的有效条件是入射粒子的波函数只被散射势微扰. 这一条件并不适用热中子散射，因为那时入射中子的最初波函数受到很强的干扰. 但是若用 δ 势表示散射势用 Born 近似又可以得到正确的结果即散射振幅 $f(\theta)$ 为常数(与 θ 和中子能量无关). 这就是用 δ 势描述热中子散射的合理性的理由，它大大简化了热中子的理论处理.

(2) 中子全反射现象在实验中有重要的作用临界角 r_c 的测量提供了确定散射长度的方法. 另一个应用是中子导管，它提供了通过管内壁全反射而长距离输运热中子束的方法，如同光线在光纤内传导.

7.33　热中子 + 质子 ⇌ 氘核 + 光子，求一盒中两种过程的截面比

题 7.33　一个速度为 $v/2$ 的热中子被一个速度为 $-v/2$ 的质子吸收产生一个氘核和一个能量为 E 的光子. 相反的过程是一个能量 E 的光子引起一个具有等大但方向相反的动量的氘核分裂为速度为 $v/2$ 和 $-v/2$ 的质子与中子. 若用 σ_a 和 σ_d 分别表示这两种过程的横截面. (1) 在一个体积为 V 的盒子里含有一定数量的中子—质子对和一定数量的光子氘核对. 每对中子-质子对的质心相对盒子静止但相对速度为 v，类似有每对光子-氘核对中光子与氘核的动量大小相等而方向相反，而每个光子能量为 E. 试证明吸收截面

$$\sigma_a = \frac{2\pi}{\hbar} V \frac{\rho_B}{v} \left| \langle B | H^{(1)} | A \rangle \right|^2$$

式中，$|A\rangle$ 表示中子—质子对的态，$|B\rangle$ 表示氘核—光子对的态，ρ_B 是 $|B\rangle$ 态的态密度，$H^{(1)}$ 是引起两个过程的微扰 Hamilton 量.

(2) 由此证明

$$\frac{\sigma_a}{\sigma_d} = 6 \left(\frac{E}{mvc} \right)^2$$

这里 m 是中子质量(与质子相同)，c 是光速.

解　(1) 用 N_A、N_B 分别表示盒中中子—质子对与氘核—光子对的数目，用 $n_{A\to B}$ 表示单位时间从 A 态到 B 态的跃迁数目，则由吸收截面的定义可知

$$\sigma_a = \sigma_{A\to B} = \frac{n_{A\to B}}{S_A} \tag{1}$$

式中，S_A 为中子流密度，这里由题意可知

$$S_A = \frac{N_A}{V} v \tag{2}$$

根据 Fermi 黄金法则有

$$n_{A\to B} = \frac{2\pi}{\hbar}\rho_B \left|\langle B|H^{(1)}|A\rangle\right|^2 N_A \tag{3}$$

将式(2)、式(3)代入式(1)，可得

$$\sigma_{A\to B} = \frac{2\pi}{\hbar} V \frac{\rho_B}{v}\left|\langle B|H^{(1)}|A\rangle\right|^2 \tag{4}$$

(2) 与上面类似，我们可以导出

$$\sigma_{B\to A} = \frac{2\pi}{\hbar} V \frac{\rho_A}{c}\left|\langle A|H^{(1)}|B\rangle\right|^2 \tag{5}$$

在由式(4)到式(5)的推理时，我们考虑到光子与氘核的相对速度为光速 c. 因为对两种过程 $H^{(1)}$ 相同故有

$$\langle A|H^{(1)}|B\rangle = \langle B|H^{(1)}|A\rangle^*$$

即

$$\left|\langle A|H^{(1)}|B\rangle\right|^2 = \left|\langle B|H^{(1)}|A\rangle\right|^2 \tag{6}$$

由式(4)、式(5)、式(6)，可知

$$\frac{\sigma_a}{\sigma_d} = \frac{\rho_B}{\rho_A}\frac{c}{v} \tag{7}$$

式中，ρ_A 的大小可以这样计算，在盒中只允许这样的中子态存在，它的 de Broglie 波是周期性的(这与质子波的数量相等，因为它们具有相等的动量大小)结果易得到

$$\rho_A = \frac{V}{2\pi^2\hbar^3}\frac{P^2}{v} g_A \tag{8}$$

式中，$P = \frac{1}{2}mv$ 是中子或质子在质心坐标系中的动量. g_A 是每个动量态的自旋简并度，此简并度为

$$g_A = (2I_n + 1)(2I_p + 1)$$

这里 I_n，I_p 分别是中子与质子的自旋. 因为 $I_n = I_p = \frac{1}{2}$，所以 $g_A = 4$. ρ_B 的表达式类似式(8)，即

$$\rho_B = \frac{V}{2\pi^2\hbar^3}\frac{P_b^2}{c} g_B \tag{9}$$

式中，P_b 是氘核动量或光子动量，因为在质心系中光子能量为 E，所以动量为 $P_b = E/c$.

因为氘核自旋 $I = 1$，简并度为 3，光子有两个极化态(沿两个垂直方向或左、右圆偏振)，所以有 $g_B = 3\times 2 = 6$.

将式(8)，式(9)及 g_A，g_B 的数值代入式(7)，最后得到

$$\frac{\sigma_a}{\sigma_d} = 6\left(\frac{E}{mvc}\right)^2$$

7.34　1keV 质子被氢原子散射时的散射截面

题 7.34　考虑 1keV 的质子被氢原子散射. (1) 角分布如何? (画图并解释). (2) 估计总截面. 用 cm^2, m^2 或 b 给出，解释你的理由.

解　考虑到电子屏蔽效应，可近似认为质子与氢原子之间的作用力程为 Bohr 半径 $a=0.53\text{Å}$

$$\frac{\hbar^2}{\mu a}\approx 1.2\text{eV}\ll 0.5\text{keV}=E_{相对}$$

因此，此题可用 Born 近似.

(1) 质子与氢原子之间相对运动能量是 0.5keV.

$$ka=\sqrt{\frac{2\mu E_{相对}}{\hbar^2}}a=29$$

质子与氢原子碰撞时，一方面受到原子核的 Coulomb 作用，另一方面受到电子的斥力. 将电子看成“电子云”，分布为 $-e\rho(r)$，则

$$V(r)=\frac{e^2}{r}-e^2\int\frac{\rho(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}\boldsymbol{r}'$$

用 Born 近似，并利用公式

$$\int\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}}{r}\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\frac{4\pi}{q^2}$$

可求得

$$f(\theta)=-\frac{\mu e^2}{2\pi\hbar^2}\int\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}\left[\frac{1}{r}-\int\frac{\rho(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\right]\mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

$$=-\frac{2\mu e^2}{\hbar^2 q^2}[1-F(\theta)]$$

式中，$\mu=\frac{m_p}{2}$，$q=2k\sin\frac{\theta}{2}$，$F(\theta)=\int\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}\rho(r)\mathrm{d}\boldsymbol{r}$.

对氢原子基态，有

$$\rho(r)=|\psi_{100}|^2=\frac{1}{\pi a^3}\mathrm{e}^{-2r/a}$$

$$F(\theta)=\frac{1}{\pi a^3}\int\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}-2r/a}\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\frac{1}{\left(1+\frac{a^2q^2}{4}\right)^2}$$

$$f(\theta)=-\frac{\mu e^2}{2\hbar^2k^2}\cdot\frac{1}{\sin^2(\theta/2)}\left\{1-\frac{1}{\left[1+a^2k^2\sin^2(\theta/2)\right]^2}\right\}$$

考虑粒子的全同性(两质子)，应有

单态： $\sigma_s = |f(\theta)+f(\pi-\theta)|^2$

三态： $\sigma_a = |f(\theta)-f(\pi-\theta)|^2$

则散射截面(不考虑极化)为

$$\sigma = \frac{1}{4}\sigma_s + \frac{3}{4}\sigma_a$$

我们考虑几个特殊情况：

(i) $\theta \approx 0$

$$\sigma_s = \frac{\mu^2 e^4}{4\hbar^4 k^4}\left[\frac{1-F(\theta)}{\sin^2(\theta/2)} + \frac{1-F(\pi-\theta)}{\cos^2(\theta/2)}\right]^2$$

$$\approx \frac{\mu^2 e^4}{4\hbar^4 k^4}\left[2a^2k^2 + \frac{1}{\cos^2(\theta/2)}\right]^2$$

$$\approx \frac{\mu^2 e^4}{\hbar^4} a^4 = \left(\frac{m_p}{2m_a}\right)^2 a^2$$

第二步利用展开式

$$\frac{1}{(1+x)^2} \approx 1-2x, \quad (x\approx 0) \text{ 及 } a^2k^2 \gg 1$$

同理可得

$$\sigma_a = \left(\frac{m_{\rm p}}{2m_{\rm a}}\right)^2 a^2$$

(ii) $\theta = \pi$. 同理可求得

$$\sigma_s = \sigma_a = \left(\frac{m_{\rm p}}{2m_{\rm a}}\right)^2 a^2$$

(iii) $a^2k^2\sin^2\dfrac{\theta}{2} = 10$ 时

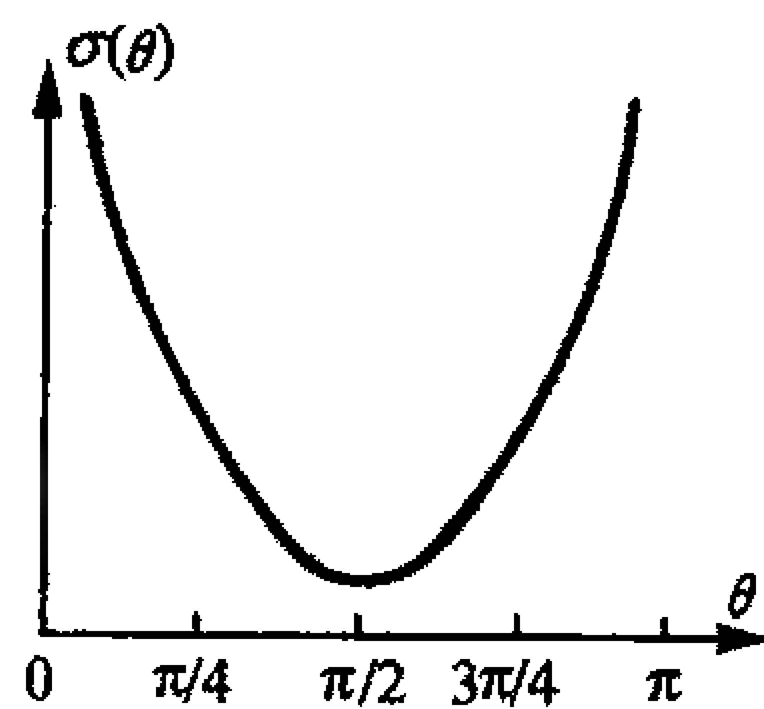
$$\theta \approx 0.07\pi$$

所以当 $0.07 \leqslant \theta \leqslant 0.93\pi$ 时

$$\sigma(\theta) = \frac{1}{4}\cdot\frac{\mu^2 e^4}{4\hbar^4 k^4}\left[\frac{1}{\sin^2(\theta/2)} + \frac{1}{\cos^2(\theta/2)}\right]^2$$

$$+\frac{3}{4}\cdot\frac{\mu^2 e^4}{4\hbar^4 k^4}\left[\frac{1}{\sin^2(\theta/2)} - \frac{1}{\cos^2(\theta/2)}\right]^2$$

$$= \frac{\mu^2 e^4}{\hbar^4 k^4}\cdot\frac{3\cos^2\theta + 1}{\sin^4\theta}$$



题图 7.34

令 $\sigma_0 = \dfrac{\mu^2 e^4}{\hbar^4 k^4}$，角分布如题图 7.34 所示.

(2) 我们仅考虑较大角度的散射总截面，

$$\sigma_t = 2\pi\sigma_0\int_{0.07\pi}^{0.93\pi}\frac{3\cos^2\theta+1}{\sin^4\theta}\sin\theta\mathrm{d}\theta$$
$$=2\pi\sigma_0\int_{0.07\pi}^{0.93\pi}\frac{4-3\sin^2\theta}{\sin^3\theta}\mathrm{d}\theta$$
$$=2\pi\sigma_0\left(-\ln\tan\frac{\theta}{2}-2\frac{\cot\theta}{\sin\theta}\right)\Bigg|_{0.07\pi}^{0.93\pi}$$
$$=155\pi\sigma_0$$

小角度散射总截面比较大，

$$\sigma_{t小} > 2\pi\int_0^{0.07\pi}\sigma(0.07\pi)\sin\theta\mathrm{d}\theta\times 2$$
$$=2\pi\times 1703\sigma_0\left[1-\cos(0.07\pi)\right]\times 2$$
$$\sigma_{t小} > 164\pi\sigma_0$$

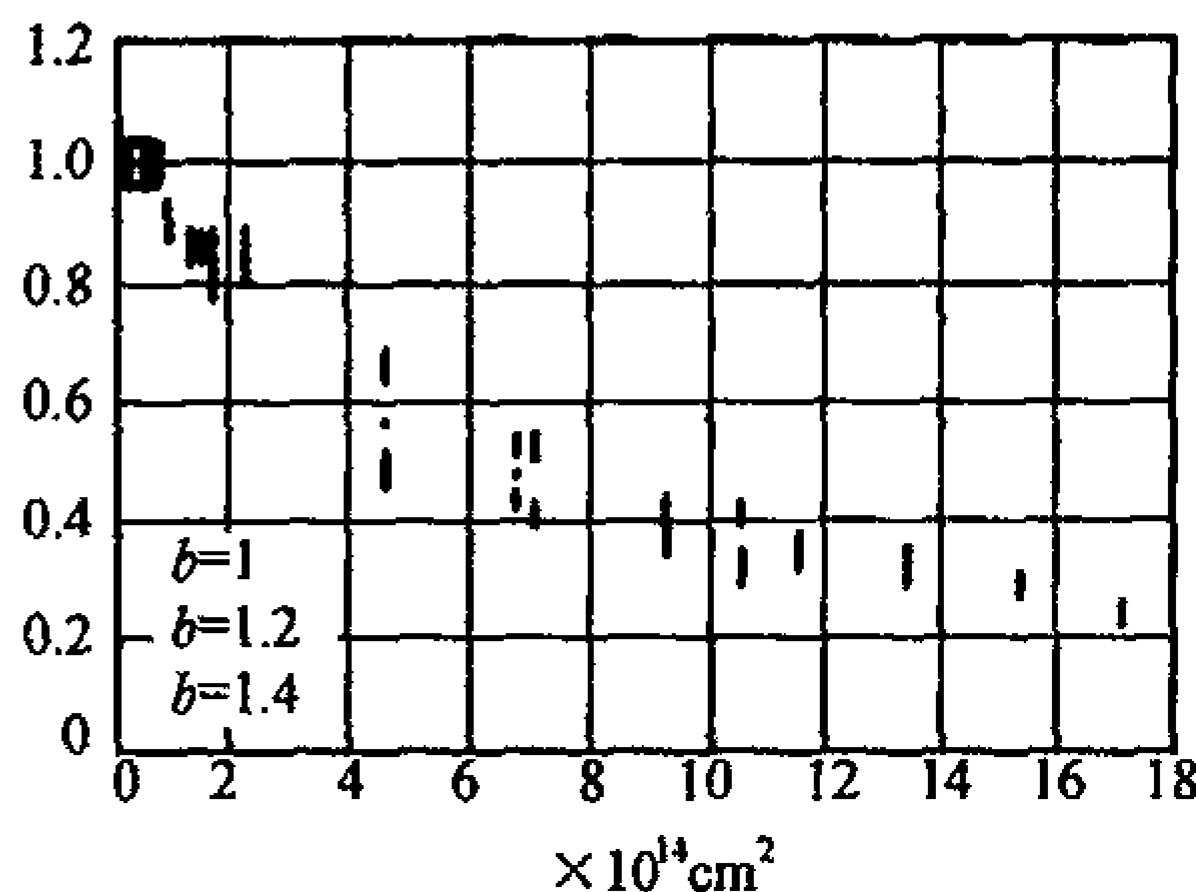
7.35 根据高能电子被核散射的结果考虑核电荷的分布

题 7.35 高能电子被核散射的研究给出核及核子中电荷分布的非常有用的信息. 这里我们考虑该理论的一简单变形，认为电子自旋为 0，同时我们也假设电荷为 Z 的核在空间固定(即具有无限大质量). 设核电荷分布是球对称的，除此之外不再加限制. 以 $\rho(x)$ 标记核电荷密度.

以 $\boldsymbol{p}_i,\boldsymbol{p}_f$ 分别表示电子的始、末动量，$f_{\mathrm{e}}(\boldsymbol{p}_i,\boldsymbol{p}_f)$ 表示电子被一点核(电荷 Z)散射的一级 Born 近似给出的散射振幅. 而 $f(\boldsymbol{p}_i,\boldsymbol{p}_f)$ 则表示一级 Born 近似下电子被具有同样电荷数的实际核散射的散射振幅. 以 $\boldsymbol{q}=\boldsymbol{p}_i-\boldsymbol{p}_f$ 表示动量转移，量 F 定义为

$$f(\boldsymbol{p}_i,\boldsymbol{p}_f)=F(q^2)f_{\mathrm{e}}(\boldsymbol{p}_i,\boldsymbol{p}_f)$$

且称之为形状因子. 容易看出 F 仅仅通过 q^2 对 $(\boldsymbol{p}_i,\boldsymbol{p}_f)$ 有依赖关系. (1) 形状因子 $F(q^2)$ 与电荷密度 $\rho(\boldsymbol{x})$ 的 Fourier 变换有一简单关系. 在非相对论的 Schrödinger 理论框架下叙述并导出这个关系. 电子运动的非相对论假设只是为了使问题尽可能简化，如果仔细考虑，则可能清楚地看出这个假设是无关的，即在实验时的相对论情形可以用相同的结论. 同样，忽略电子自旋也不影响我们这里所涉及问题的本质. (2) 题图 7.35 给出的是确定质子的形状因子的实验结果，应该认为我们的理论可以应用到这些数据上. 在给出的数据基础上，计算质子的电荷半径的均方根值.



题图 7.35

提示：在均方根半径与 $F(q^2)$ 对 q^2 的导数（$q^2=0$ 时）间有一简单关系，找出这个关系再计算.

解 (1) 在非相对论近似上，中心力场的散射振幅的一级 Born 近似为

$$f(\boldsymbol{p}_i,\boldsymbol{p}_f)=-\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^\infty \mathrm{d}r'r'V(r')\sin qr'$$

对于点核，其散射势为

$$V_\mathrm{e}(r)=-\frac{Ze^2}{r}$$

而对于实际电荷分布的核，其散射势为

$$V(r)=-e\int\frac{\rho(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}'}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}=-4\pi e\int_0^\infty\frac{\rho(r')r'^2\mathrm{d}r'}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}$$

或者表示成微分方程形式(注意此处 V 是势能，并非电场的势，而且电子电荷为负)

$$\nabla^2V(r)=\frac{1}{r}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}(rV)=4\pi e\rho(r)$$

代入 Born 近似公式，可得

$$\begin{aligned}f(\boldsymbol{p}_i,\boldsymbol{p}_f)&=-\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^\infty \mathrm{d}rrV(r)\sin qr\\&=-\frac{2m}{\hbar^2 q}\left(-\frac{1}{q^2}\right)\int_0^\infty \mathrm{d}r(rV)''\sin qr\\&=\frac{2m}{\hbar^2 q}\cdot\frac{4\pi e}{q^2}\int_0^\infty \mathrm{d}rr\rho(r)\sin qr\end{aligned}\tag{1}$$

而在点荷情形下，只有在 $r=0$ 附近积分才有贡献，注意到

$$4\pi\int_0^\infty \mathrm{d}rr\rho(r)\sin qr=4\pi q\int_0^\infty \mathrm{d}rr^2\rho(r)=qZe$$

所以

$$f_\mathrm{e}(\boldsymbol{p}_i,\boldsymbol{p}_f)=\frac{2mZe^2}{\hbar^2q^2}\tag{2}$$

比较式(1)、式(2)两式则得出

$$f(\boldsymbol{p}_i,\boldsymbol{p}_f)=f_\mathrm{e}(\boldsymbol{p}_i,\boldsymbol{p}_f)\frac{4\pi}{Ze}\int_0^\infty \mathrm{d}rr^2\rho(r)\frac{\sin qr}{qr}$$

于是得出形状因子与电荷密度间的关系

$$F(q^2)=\frac{4\pi}{Ze}\int_0^\infty \mathrm{d}rr^2\rho(r)\frac{\sin qr}{qr}\tag{3}$$

或

$$F(q)=\frac{1}{Ze}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\rho(r)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}$$

这就是所要求的 Fourier 变换关系，

(2) 将式(3)两边对 q 微商，则有

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}q}=\frac{4\pi}{Ze}\int_0^\infty \mathrm{d}r r^2\rho(r)\left(\frac{r\cos qr}{qr}-\frac{\sin qr}{q^2 r}\right)$$

所以

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}(q^2)}=\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}q}\cdot\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}(q^2)}=\frac{1}{2q}\cdot\frac{4\pi}{Ze}\int_0^\infty \mathrm{d}r r^2\rho(r)\left(\frac{r\cos qr}{qr}-\frac{\sin qr}{q^2 r}\right)$$

为了得到 $\left.\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}(q^2)}\right|_{q=0}$，先计算极限

$$\lim_{q\to 0}\left(\frac{r\cos qr}{q^2 r}-\frac{\sin qr}{q^3 r}\right)=\lim_{q\to 0}\left\{\frac{r\left[1-\frac{1}{2}(qr)^2\right]}{q^2 r}-\frac{qr-\frac{1}{6}(qr)^3}{q^3 r}\right\}$$

$$=\lim_{q\to 0}\left(-\frac{1}{3}r^2\right)=-\frac{r^2}{3}$$

于是

$$\left.\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}(q^2)}\right|_{q=0}=-\frac{1}{6}\cdot\frac{4\pi}{Ze}\int_0^\infty \mathrm{d}r r^2\rho(r)r^2=-\frac{1}{6}\langle r^2\rangle$$

在所给的图 7.10 中求出 $q^2=0$ 时 $F(q^2)$ 对 q^2 的导数值，则可求出电荷方均根半径，

$$\sqrt{\langle r^2\rangle}=\left(-6\left.\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}(q^2)}\right|_{q=0}\right)^{1/2}$$

具体计算略去.

7.36 Ramsauer-Townsend 效应的起源及低能电子的最大散射截面

题 7.36 早在 20 世纪 20 年代，Ramsauer 和 Townsend 各自独立地发现对于能量约 0.4eV 的电子，在气态氩原子上的散射截面比几何散射截面(πa^2, a 为原子半径)小得多. 同时还发现，6eV 的电子的散射截面是几何散射截面的 3.5 倍，而且散射几乎是各向同性的. 问反常散射截面的起源为何？对于低能电子来说，最大的可达到的散射截面多大？

解 当吸引势足够强时，在某一能量处 $l=0$ 的分波可能被拉入半周，其相移 σ_0 为π. 此时 $l=0$ 的分波对散射截面没有贡献，而其他分波的贡献又很小(能量很低)，因而散射截面变得很小，这就是所谓的 Ramsauer-Townsend 效应. 对于低能电子来说，最大的可能的截面是几何散射截面的 4 倍.

7.37 由光在介质中被一散射中心引起的散射振幅推导色散关系

题 7.37 设 $f(\omega)$ 为某光学介质中光在一个散射中心上向前散射的散射振幅. 如果将入射和出射光波分别记为 $A_{\mathrm{in}}(\omega)$ 和 $A_{\mathrm{out}}(\omega)$，则有 $A_{\mathrm{out}}(\omega)=f(\omega)A_{\mathrm{in}}(\omega)$. 假定 Fourier 变换

$$\tilde{A}_{in}(x-t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}d\omega e^{i\omega(x-t)}A_{in}(\omega)$$

对 $x-t>0$ 值为零. (1) 用因果性关系(信号传播速度不大于光速 $c=3\times10^8\text{m/s}$)证明 $f(\omega)$ 在上半复平面 $\text{Im}\,\omega>0$ 是解析的. (2) 利用 $f(\omega)$, $\tilde{A}_{in}$ 和 $\tilde{A}_{out}$ 实部的解析性，假定 $f(\omega)$ 在无穷远处有界，推导色散关系

$$\text{Re}(f(\omega+i\varepsilon)-f(0))=\frac{2\omega^2}{\pi}p\int_0^{\infty}d\omega'\frac{\text{Im}\,f(\omega'+i\varepsilon)}{\omega'(\omega'^2-\omega^2)}$$

ε 为任意小的正数.

解 (1) $t<x$ 时 $\tilde{A}_{in}(x-t)=0$ 意味着 $t<x$ 时

$$\tilde{A}_{out}(x-t)=0$$

因此

$$A_{\substack{in\\out}}(\omega)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{0}d\tau e^{-i\omega\tau}\tilde{A}_{\substack{in\\out}}(\tau)$$

当 $\text{Im}\,\omega>0$ 时为正则函数. 因为 $\tau<0$，积分项中的因子 $\exp(\text{Im}\,\omega\tau)$ 收敛.

$A_{out}(\omega)=f(\omega)A_{in}(\omega)$，当 $\text{Im}(\omega)>0$ 时 $f(\omega)$ 也是解析的. 因为对于一大类函数 $A_{in}(\omega)$ 来说 $f(\omega)$ 为散射振幅，个别 $A_{in}(\omega)$ 可能的零点并不意味着是 $f(\omega)$ 的极点.

(2) 对 $\omega\to\infty$, $0\leqslant\arg\omega\leqslant\pi$，我们有 $|f(\omega)|<M$. 假定 $f(0)$ 是有界的(否则另选一点)，则

$$\chi(\omega)=\frac{f(\omega)-f(0)}{\omega}$$

在无限远处是充分小的，因此

$$\chi(\omega)=\frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{+\infty}d\omega'\frac{x(\omega'+io)}{\omega'-\omega},\qquad \text{Im}\,\omega>0$$

利用 $\dfrac{1}{\omega'-\omega-io}=\dfrac{P}{\omega'-\omega}+i\pi\delta(\omega'-\omega)$, (当 ω 为实数时)得 $R_0\chi(\omega)=\dfrac{P}{\pi}\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty}d\omega'\frac{\text{Im}\,\chi(\omega'+io)}{\omega'-\omega}$, $A_{\substack{in\\out}}$ 为实，意味着 $A^*_{\substack{in\\out}}(-\omega^*)=A_{\substack{in\\out}}(\omega)$，因此 $f^*(\omega^*)=f(-\omega)$. 故

$$\text{Im}\,f(\omega+io)=-\text{Im}\,f(-\omega+io)$$

且

$$\text{Re}\left[f(\omega+io)-f(0)\right]=\frac{2\omega^2}{\pi}P\int_0^{\infty}d\omega'\frac{\text{Im}\,f(\omega'+io)}{\omega'(\omega'^2-\omega^2)}.$$

式中，P 代表积分取主值.

7.38 两个自旋粒子在作用势 $H_{int}=A\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2\dfrac{e^{-\mu r}}{r}$ 下的散射截面

题 7.38 一个自旋为 $\dfrac{1}{2}$，质量为 m，能量为 $E=\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}$ 的粒子与一个无限重的自旋为 1/2 的靶粒子散射. 相互作用 Hamilton 量为

$$H_{\text{int}} = A\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 \frac{e^{-\mu r}}{r}, \qquad \mu > 0$$

式中，$\boldsymbol{\sigma}_1$和$\boldsymbol{\sigma}_2$是入射粒子及靶粒子的自旋. 在最低级 Born 近似下求微分散射截面$\frac{d\sigma}{d\Omega}$，对自旋初态求平均，对自旋极化末态求和. 并将$\frac{d\sigma}{d\Omega}$表示成k及散射角θ的函数.

解　设粒子沿z方向入射，即$\boldsymbol{k}_0 = k\boldsymbol{e}_z$. 在最低级的 Born 近似下，散射振幅为

$$\begin{aligned}f(\theta) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{i(\boldsymbol{k}_0-\boldsymbol{k})\cdot \boldsymbol{r}}\left\langle x_f \middle| A\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2 \middle| x_i\right\rangle \frac{e^{-\mu r'}}{r'} d^3 r' \\ &= \frac{-m}{2\pi\hbar^2}\int e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}\left\langle x_f \middle| A\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2 \middle| x_i\right\rangle \frac{e^{-\mu r'}}{r'} d^3 r' \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2}\left\langle x_f \middle| A\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2 \middle| x_i\right\rangle \frac{1}{\mu^2+q^2}\end{aligned}$$

式中

$$\boldsymbol{q} = \boldsymbol{k}_0 - \boldsymbol{k}, \qquad q = 2k\sin\frac{\theta}{2}$$

$\left|x_i\right\rangle, \left|x_f\right\rangle$分别为散射初态与散射末态的自旋态.

对系统总自旋$S=0$态

$$f_0(\theta) = \frac{6Am}{\mu^2+q^2}, \qquad \frac{d\sigma_0}{d\Omega} = \frac{(6Am)^2}{(\mu^2+q^2)^2}$$

对系统总自旋$S=1$态

$$f_1(\theta) = -\frac{2Am}{\mu^2+q^2}, \qquad \frac{d\sigma_1}{d\Omega} = \frac{(2Am)^2}{(\mu^2+q^2)^2}$$

设入射粒子自旋初态为$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}^p = \alpha_p$，靶核自旋初态为$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}^T = \alpha_T$，则体系的自旋初态为$\Theta_{11} = \alpha_p\alpha_T$，此时的散射波函数为$f_1(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}\Theta_{11}$，而相应的极化微分散射截面为

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2};\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right) = \left|f_1(\theta)\right|^3$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2};\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right) = \frac{d\sigma}{d\Omega}\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2};-\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right) = \frac{d\sigma}{d\Omega}\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2};-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right) = 0$$

同样的方法，注意体系的自旋三态为

$$\Theta_{11} = \alpha_p\alpha_T,\ \Theta_{1-1} = \beta_p\beta_T,\ \Theta_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_p\beta_T + \beta_p\alpha_T)$$

自旋单态为$\Theta_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_p\beta_T - \beta_p\alpha_T)$，并且$\alpha_p\beta_T = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Theta_{10}+\Theta_{00})$等，可求得其他的极化微分散射截面为

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{2};\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right)=\frac{1}{4}\left|f_1(\theta)-f_0(\theta)\right|^2$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{2};-\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right)=\frac{1}{4}\left|f_1(\theta)-f_0(\theta)\right|^2$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{2};\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right)=\frac{d\sigma}{d\Omega}\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{2};-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right)=0$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}\left(-\frac{1}{2}\frac{1}{2};\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right)=\frac{1}{4}\left|f_1(\theta)-f_0(\theta)\right|^2$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}\left(-\frac{1}{2}\frac{1}{2};-\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right)=\frac{1}{4}\left|f_1(\theta)+f_0(\theta)\right|^2$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}\left(-\frac{1}{2}\frac{1}{2};\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right)=\frac{d\sigma}{d\Omega}\left(-\frac{1}{2}\frac{1}{2};-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right)=0$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}\left(-\frac{1}{2}-\frac{1}{2};-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right)=\left|f_1(\theta)\right|^2$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}\left(-\frac{1}{2}-\frac{1}{2};\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right)=\frac{d\sigma}{d\Omega}\left(-\frac{1}{2}-\frac{1}{2};-\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right)=\frac{d\sigma}{d\Omega}\left(-\frac{1}{2}-\frac{1}{2};\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right)=0$$

对自旋初态(i)求平均，对自旋末态(f)求和，得

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma}{d\Omega}&=\frac{1}{4}\sum_{s_{pz}^{(i)},s_{Tz}^{(i)},s_{pz}^{(f)},s_{Tz}^{(f)}}\frac{d\sigma}{d\Omega}\left(s_{pz}^{(i)},s_{Tz}^{(i)};s_{pz}^{(f)},s_{Tz}^{(f)}\right)\\&=\frac{1}{4}\left[3f_1^2(\theta)+f^2(\theta)\right]=\frac{12A^2m^2}{\mu^2+4k^2\sin^2\dfrac{\theta}{2}}.\end{aligned}$$

注 此题后半部作自旋统计时，可有一些十分简便的办法. 但这里的遍举法较具体详尽.

7.39 用 Born 近似计算中子-中子散射的散射截面

题 7.39 用 Born 近似计算中子-中子散射的微分散射截面. 假设散射势对于自旋三重态为零，对于自旋单态为

$$V(r)=V_0\frac{e^{-\mu r}}{r}$$

对非极化(无规自旋取向)初始态计算截面.

解 Born 近似给出

$$\begin{aligned}f_{s(\theta)}&=-\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^\infty drrV(r)\sin qr\\&=-\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^\infty drV_0e^{-\mu r}\sin qr\\&=-\frac{2mV_0}{\hbar^2 q}\frac{q}{q^2+\mu^2},\qquad q=2k\sin\frac{\theta}{2}\end{aligned}$$

式中，k 是中子相对运动的波矢，$m=\dfrac{m_n}{2}$ 为约化质量.

考虑到自旋单态的自旋波函数反对称，所以空间波函数应对称化，这样就有

$$\begin{aligned}\sigma_s &= |f(\theta)+f(\pi-\theta)|^2 \\ &= \frac{4m^2V_0^2}{\hbar^4}\left(\frac{1}{\mu^2+4k^2\sin^2\dfrac{\theta}{2}}+\frac{1}{\mu^2+4k^2\cos^2\dfrac{\theta}{2}}\right)^2 \\ &= \frac{16m^2V_0^2(\mu^2+2k^2)^2}{\hbar^4\left(\mu^2+4k^2\sin^2\dfrac{\theta}{2}\right)^2\left(\mu^2+4k^2\cos^2\dfrac{\theta}{2}\right)^2}\end{aligned}$$

又因中子初始是非极化的，故所求散射截面为

$$\begin{aligned}\sigma(\theta) &= \frac{1}{4}\sigma_s+\frac{3}{4}\sigma_t=\frac{1}{4}\sigma_s \\ &= \frac{4m^2V^2(\mu^2+2k^2)^2}{\hbar^4\left(\mu^2+4k^2\sin^2\dfrac{\theta}{2}\right)^2\left(\mu^2+4k^2\cos^2\dfrac{\theta}{2}\right)^2}\end{aligned}$$

7.40 低能中子在质子上的散射与不同自旋态的关系

题 7.40 低能中子在质子上的散射是与自旋有关的. 当中子-质子体系是自旋单态时截面为 $\sigma_1=78\times10^{-24}\text{cm}^2$，自旋三重态时截面是 $\sigma_3=2\times10^{-24}\text{cm}^2$. 令 f_3 和 f_1 是对应的散射振幅. 用 f_3 和 f_1 表示下面的答案：(1) 非极化中子在非极化质子上的总截面是多少？(2) 设一个原先自旋向上的中子在一个最初自旋向下的质子上散射，中子和质子自旋翻转的概率是多少？(3) H_2 分子有两种形式——质子总自旋为 1 的为正氢，总自旋为 0 的为仲氢. 设有一低能中子($\lambda_n \gg \langle d\rangle$, $\langle d\rangle$ 是分子中质子的平均距离)在氢分子上散射. 非极化中子在非极化的正氢和仲氢上散射截面之比是多少？

解 (1) 定义算子

$$f=\frac{f_1+3f_3}{4}+\frac{f_3-f_1}{4}(\boldsymbol{\sigma}_n\cdot\boldsymbol{\sigma}_p)$$

可证 f 在三重态和单态上的本征值为 f_3 和 f_1. 所以，总截面为

$$\sigma=4\pi\left\langle f^2\right\rangle$$

$$f^2=\frac{3}{4}f_3^2+\frac{1}{4}f_1^2+\frac{1}{4}\left(f_3^2-f_1^2\right)\left(\boldsymbol{\sigma}_n\cdot\boldsymbol{\sigma}_p\right)$$

设入射中子自旋态为

$$\begin{pmatrix}e^{-i\alpha}\cos\beta\\ e^{i\alpha}\sin\beta\end{pmatrix}$$

式中，$(2\beta,\ 2\alpha)$ 为中子自旋方向的极角. 考虑极化质子态$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$

$$\sigma_t = 4\pi\begin{pmatrix}e^{-i\alpha}\cos\beta\\ e^{i\alpha}\sin\beta\end{pmatrix}_n^\dagger\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p^\dagger f^2\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p\begin{pmatrix}e^{-i\alpha}\cos\beta\\ e^{i\alpha}\sin\beta\end{pmatrix}_n$$
$$=\pi\left[3f_3^2+f_1^2-(f_3^2-f_1^2)\cos 2\beta\right]$$
$$=\frac{3}{4}\sigma_3+\frac{1}{4}\sigma_1-(\sigma_3-\sigma_1)\frac{\cos 2\beta}{4}$$

中子束无极化，$\overline{\cos 2\beta}=0$

$$\sigma_t=\frac{3}{4}\sigma_3+\frac{1}{4}\sigma_1$$

由于 z 轴取向任意，非极化质子的总截面与极化质子总截面相同.

(2) 相互作用前态矢为

$$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p$$

用三重态和单态自旋波函数展开

$$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p=\frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p+\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p\right]+\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p-\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p\right]\right\}$$

散射波形式是

$$\frac{e^{ikr}}{r}\frac{1}{\sqrt{2}}\left\{f_3\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p+\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p\right]+f_1\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p-\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p\right]\right\}$$
$$=\frac{e^{ikr}}{r}\left[\frac{f_3+f_1}{2}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p+\frac{f_3-f_1}{2}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p\right]$$

所以取向翻转的概率为

$$\frac{(f_3-f_1)^2}{(f_3+f_1)^2+(f_3-f_1)^2}=\frac{1}{2}\cdot\frac{(f_3-f_1)^2}{f_3^2+f_1^2}$$

(3) 令

$$F=f_1+f_2=\frac{f_1+3f_3}{2}+\frac{1}{4}(f_3-f_1)\left[\boldsymbol{\sigma}_n\cdot\left(\boldsymbol{\sigma}_{p_1}+\boldsymbol{\sigma}_{p_2}\right)\right]$$
$$\boldsymbol{S}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_{p_1}+\boldsymbol{\sigma}_{p_2})$$

则

$$(\boldsymbol{\sigma}_n\cdot\boldsymbol{S})^2=\boldsymbol{S}^2-\boldsymbol{\sigma}_n\cdot\boldsymbol{S}$$

可得

$$F^2=\frac{1}{4}\left[\left(f_1+3f_3\right)^2+\left(5f_3^2-3f_1^2-2f_1f_3\right)\boldsymbol{\sigma}_n\cdot\boldsymbol{S}+\left(f_3-f_1\right)^2\boldsymbol{S}^2\right]$$

对于仲氢

$$\sigma_{仲} = \pi(f_1 + 3f_3)^2$$

由于没有物理上的特殊方向. 截面与入射中子的极化无关.

对于正氢

$$\sigma_{正} = \pi\left[\left(f_1 + 3f_3\right)^2 + \left(5f_3^2 - 2f_1f_3 - 3f_1^2\right)\cos 2\beta + 2\left(f_3 - f_1\right)^2\right]$$

式中，2β 是 $\boldsymbol{S}$ 与 $\boldsymbol{\sigma}_n$ 之间夹角.

中子未极化时 $\cos 2\beta = 0$

$$\sigma_{正} = \pi\left[\left(f_1 + 3f_3\right)^2 + 2(f_3 - f_1)^2\right]$$

这些结果自然与氢分子的极化与否无关. 所求比例为

$$\frac{\sigma_{正}}{\sigma_{仲}} = 1 + \frac{2(f_3 - f_1)^2}{(f_1 + 3f_3)^2}$$

7.41　$V(r) = \begin{cases} \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 V_0, & r \leqslant a \\ 0, & r > a \end{cases}$，计算总散射截面

题 7.41　讨论一假想的中子-中子零能散射. 相互作用势为

$$V(r) = \begin{cases} \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 V_0, & r \leqslant a \\ 0, & r > a \end{cases}$$

式中，σ_1，σ_2 是两个中子的 Pauli 矩阵. 计算总的散射截面. 入射、及靶中子均未极化.

解　在耦合表象中讨论此问题. 令

$$\boldsymbol{S}_1 + \boldsymbol{S}_2 = \boldsymbol{S}, \qquad 即 \qquad \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_1 + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_2 = \boldsymbol{S}$$

所以

$$3 + 3 + 2\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 = 4S(S+1)$$

$$\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 = 2S(S+1) - 3$$

式中，$S=1$ 或 0. 因而可见 S 的本征态也是 $V(r)$ 的本征态.

只考虑 s 波，即空间波函数是对称的，根据 Pauli 原理，自旋部分应反对称. 所以有

$$S = 0$$

$$V = \begin{cases} -3V_0, & r < a \\ 0, & r > a \end{cases}$$

低能只考虑 s 波，当 $r < a$ 时，有

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u + k_0^2 u = 0$$

$$u(r) = A\sin k_0 r$$

式中，$u(r) = r\psi$，$k_0^2 = 3mV_0/\hbar^2$. 当 $r > a$ 时，有

$$\frac{d^2u}{dr^2}+k_1u=0$$
$$u(r)=\sin(k_1r+\delta_0)$$

式中，$u(r)=r\psi(r)$, $k_1^2=\frac{2m}{\hbar^2}E$.

利用$r=a$处$u(r)$的一阶导数及其本身连续，有

$$k_0\cot k_0a=k_1\cot(k_1a+\delta_1)$$

$k_1\to 0$则，有

$$\delta_0=\frac{k_1}{k_0}\tan k_0a-k_1a=k_1a\left(\frac{\tan k_0a}{k_0a}-1\right)$$

由于全同性，有

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)+f(\pi-\theta)|^2$$
$$=\frac{1}{k^2}\left|\sum_{l=0,2,4}2(2l+1)e^{i\delta a}\sin\delta_lP_l(\cos\theta)\right|^2$$

只有s分波，故

$$\sigma(\theta)=\frac{4}{k_1^2}\sin^2\delta_0=\frac{4}{k_1^2}\delta_0^2$$
$$\sigma_{t_{s=0}}=\frac{16\pi}{k_1^2}k_1^2a^2\left(\frac{\tan k_0a}{k_0a}-1\right)^2=16\pi a^2\left(\frac{\tan k_0a}{k_0a}-1\right)^2$$

取统计平均$S=0$只占1/4，有

$$\sigma_t=4\pi a^2\left(\frac{\tan k_0a}{k_0a}-1\right)^2$$

式中的截面是接收到中子的截面.

7.42 自旋1/2的粒子束被重核散射，散射势为$C\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2\delta^{(3)}(x_1-x_2)$求散射截面

题7.42 由自旋为$\frac{1}{2}$，质量为m的粒子组成的一个束流被一个由重核组成的靶所散射，核自旋仍为$\frac{1}{2}$.一个实验粒子与核的作用为$C\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2\delta^{(3)}(x_1-x_2)$，其中$C$是一个小的常数，$\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2$是实验粒子及核的自旋，$x_1$、$x_2$是它们相应的位置. (1) 求对自旋初态作平均后的微分散射截面. (2) 如果所有入射粒子的自旋都指向正Z轴方向，而核的自旋取向是任意的. 问经过散射后入射粒子的自旋仍指向正Z轴方向的概率是多少?

解 (1) 由于靶核形成了一个固定的散射中心，质心系和实验室系统就是同一的，所以系统的相对运动方程为

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_r^2+C\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2\delta^{(3)}(\boldsymbol{r})\right)\psi(r)=E\psi(r)$$

因 C 是一个小的常数，所以可用 Born 近似

$$f(\theta)=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0)\cdot\boldsymbol{r}'}C\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2\delta^{(3)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'$$

$$=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}C\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2$$

微分散射截面

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2=\frac{c^2m^2}{(2\pi\hbar^2)^2}|\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2|^2$$

$$\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2=\frac{1}{2}\left(S^2-s_1^2-s_2^2\right)$$

式中，$\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2$.

对系统总自旋 $S=0$ 态

$$\sigma_0(\theta)=\frac{c^2m^2}{(2\pi\hbar^2)^2}\left|\frac{1}{2}\cdot\left(-\frac{3}{2}\right)\hbar^2\right|^2=\frac{(3mc)^2}{(8\pi)^2}$$

对系统总自旋 $S=1$ 态

$$\sigma_1(\theta)=\frac{c^2m^2}{(2\pi\hbar^2)^2}\left|\frac{1}{2}\cdot\frac{1}{2}\hbar^2\right|^2=\frac{(mc)^2}{(8\pi)^2}$$

所以，对自旋初态平均后的微分散射截面，即非极化散射截面为

$$\sigma_t(\theta)=\frac{1}{4}\sigma_0(\theta)+\frac{3}{4}\sigma(\theta)=\frac{3m^2c^2}{(8\pi)^2}$$

(2) 这时若考虑散射后粒子自旋仍向上，则散射后体系的两个无关的自旋态为 $\left|x_1^1\right\rangle$ 和

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\chi_0^1\right\rangle+\left|\chi_0^0\right\rangle\right)$$

将这两个态分别和 $|\psi\rangle_f$ 内积，得两个相应的概率幅，于是得到这种情况下的散射截面，为

$$\sigma^{(t)}=|c_1(t)|^2\sigma_1(\theta)+\frac{1}{4}|c_2(t)|^2|f_1(\theta)+f_0(\theta)|^2$$

对系综平均即得

$$\sigma^{(t)}=\frac{1}{2}\sigma_1(\theta)+\frac{1}{8}|f_1(\theta)+f_2(\theta)|^2=\frac{m^2c^2}{(8\pi)^2}$$

最后，所求概率为

$$P=\frac{\sigma^{(t)}}{\sigma_t}=\frac{1}{3}$$

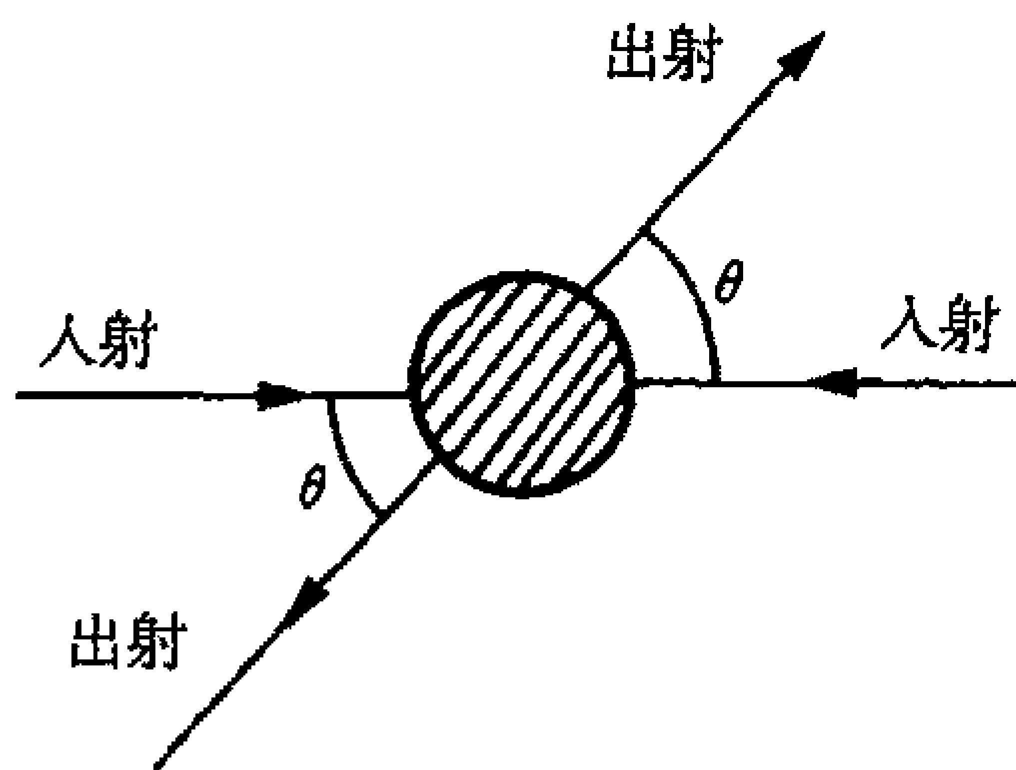
7.43　两个自旋 1/2 的全同粒子在屏蔽 Coulomb 势 $e^2\dfrac{\mathrm{e}^{-\lambda r}}{r}$ 下的散射截面

题 7.43　(1)　两个自旋为 $\frac{1}{2}$，质量为 m 的全同粒子间存在一个“屏蔽”Coulomb 势

相互作用

$$V(r)=e^2\frac{\mathrm{e}^{-\lambda r}}{r}$$

式中，$1/\lambda$ 为屏蔽长度. 设有一散射实验，其中每个粒子在质心系中都具有动能 E. 设 E 很大，入射粒子的自旋取向是随机的.（在质心系中）计算散射截面 $\frac{\partial\sigma}{\partial\Omega}$，出射粒子的方向与入射粒子方向的夹角记为 θ（题图 7.43）(2) 假定在 θ 处观察出射粒子，散射后两粒子处于总自旋为 1 的态的概率有多大？如果一个粒子自旋沿正 z 轴方向，另一个粒子自旋也沿正 z 方向的概率是多大？(3) 如果你在以上计算中所作近似是正确的，粒子能量要多大？若粒子的能量远低于上值，在低能极限下，散射后两粒子处于 $S=1$ 态的概率有多大？



题图 7.43

解　(1) 在质心系中，两粒子是完全对称的. 相当于在两粒子连线中点，有一个固定的力心

$$V(\rho)=e^2\frac{\mathrm{e}^{-2\lambda\rho}}{2\rho}$$

式中，$\rho=r/2$ 为两粒子间距的一半.

由于入射能量很高，可以采用 Born 近似. Born 一级近似给出的结果是

$$\begin{aligned}f(\theta)&=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int\mathrm{e}^{-\mathrm{i}q\cdot\rho}V(\rho)\mathrm{d}^3\rho\\&=-\frac{2m}{\hbar^2q}\int_0^{\infty}\mathrm{d}\rho\frac{e^2}{2}\mathrm{e}^{-2\lambda\rho}\sin q\rho\\&=-\frac{me^2}{\hbar^2\left[q^2+(2\lambda)^2\right]}\end{aligned}$$

式中，q 为粒子散射前后动量改变，$q=2k\sin\frac{\theta}{2}$.

考虑到全同粒子系统波函数对称性问题：

对 $S=0$ 态，　$\sigma_s(\theta)=|f(\theta)+f(\pi-\theta)|^2$，

对 $S=1$ 态，　$\sigma_a(\theta)=|f(\theta)-f(\pi-\theta)|^2$.

$$\begin{aligned}\sigma_s(\theta)&=\frac{1}{4}\left(\frac{me^2}{\hbar^2}\right)^2\left[\frac{1}{k^2\sin^2\frac{\theta}{2}+\lambda^2}+\frac{1}{k^2\cos^2\frac{\theta}{2}+\lambda^2}\right]^2\\&=\frac{1}{4}\left(\frac{ml^2}{\hbar^2}\right)^2\left[\frac{k^2+2\lambda^2}{\left(k^2\sin^2\frac{\theta}{2}+\lambda^2\right)\left(k^2\cos^2\frac{\theta}{2}+\lambda^2\right)}\right]^2\end{aligned}$$

$$\sigma_a(\theta)=\frac{1}{4}\left(\frac{ml^2}{\hbar^2}\right)^2\left[\frac{k^2\cos\theta}{\left(k^2\sin^2\frac{\theta}{2}+\lambda^2\right)\left(k^2\cos^2\frac{\theta}{2}+\lambda^2\right)}\right]^2$$

$$\begin{aligned}\sigma_t&=\frac{1}{4}\sigma_s+\frac{3}{4}\sigma_a\\&=\frac{1}{16}\left(\frac{ml^2}{\hbar^2}\right)^2\frac{(k^2+2\lambda^2)^2+3(k^2\cos\theta)^2}{\left[\left(k^2\sin^2\frac{\theta}{2}+\lambda^2\right)\left(k^2\cos^2\frac{\theta}{2}+\lambda^2\right)\right]^2}\end{aligned}$$

(2) 若入射粒子仍然是非极化的，那么处在总自旋为 1 的态的概率为

$$\frac{\frac{3}{4}\sigma_a}{\sigma_t}=\frac{3(k^2\cos\theta)^2}{(k^2+2\lambda^2)^2+3(k^2\cos\theta)^2}$$

两个出射粒子自旋同沿正 z 方向概率为

$$\frac{\frac{1}{4}\sigma_a}{\sigma_t}=\frac{(k^2\cos\theta)^2}{(k^2+2\lambda^2)^2+3(k^2\cos\theta)^2}.$$

(3) $l=0$ 分波是前后对称的 $f(\theta)=f(\pi-\theta)$. 它对 $S=1$ 态无贡献，但对 $S=0$ 态为主要贡献. 因此 $S=1$ 态散射截面与 $S=0$ 态散射截面之比相当于 $l=1$ 分波与 $l=0$ 分波的散射截面之比，在低能极限下接近于 0.

7.44 Born 近似计算电子在散射势 $V=\mathrm{e}^{-\mu r^2}(A+B\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})$ 下的散射截面

题 7.44 一个动量 p 质量 m 的电子穿过一个与自旋有关(宇称破环)的势

$$V=\mathrm{e}^{-\mu r^2}(A+B\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}),$$

并在 θ 角被散射. 式中 $\mu(>0)$, A, B 为常数，σ_x, σ_y, σ_z 是通常的 Pauli 自旋矩阵. 令 $\frac{\partial\sigma_i}{\partial\Omega}$ 是初态自旋一定而对所有自旋末态求和的微分散射截面. 下标 i 标志入射电子的初态. 特别地，若电子自旋在入射方向极化，我们可分别考虑：入射自旋"朝上"($i=\uparrow$)或"朝下"($i=\downarrow$). 在最低级 Born 近似下，计算 $\frac{\partial\sigma_\uparrow}{\partial\Omega}$ 和 $\frac{\partial\sigma_\downarrow}{\partial\Omega}$ 表示为 p 和 θ 的函数.

解 令 x 轴正向为电子入射方向，在 σ_z 对角表象中，由题设入射电子自旋波函数可表为

$$\psi_+=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}\quad\text{或}\quad\psi_-=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$$

又令 $\boldsymbol{n}$ 为 $\boldsymbol{r}$ 方向上的单位矢量，则

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\sin\theta\cos\varphi+\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{pmatrix}\sin\theta\sin\varphi$$

$$+\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\cos\theta=\begin{pmatrix}\cos\theta, & \sin\theta e^{-i\varphi}\\ \sin\theta e^{i\varphi}, & -\cos\theta\end{pmatrix}$$

先考虑ψ_+

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})\psi_+=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}\cos\theta+\sin\theta e^{-i\varphi}\\ \sin\theta e^{i\varphi}-\cos\theta\end{pmatrix}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}(\cos\theta+\sin\theta e^{-i\varphi})\alpha+\frac{1}{\sqrt{2}}(\sin\theta e^{i\varphi}-\cos\theta)\beta$$

式中，$\alpha=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$, $\beta=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$为 Pauli 表象中$\sigma_x$的本征态. 故散射振幅(带自旋)为

$$f(\theta)=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}'}V(r')\psi_+ d^3x'$$

式中，$\boldsymbol{q}=\frac{1}{\hbar}(\boldsymbol{p}_f-\boldsymbol{p}_i)$, $|\boldsymbol{q}|=q=\frac{2p}{\hbar}\sin\frac{\theta}{2}$，即

$$f(\theta)=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{-iqr'\cos\theta'}e^{-\mu r'^2}\left[A\psi_++r'B(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})\psi_+\right]d^3x'$$

$$=I_1(\theta)\alpha+I_2(\theta)\beta$$

式中

$$I_1(\theta)=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{-iqr'\cos\theta'}e^{-\mu r'^2}\frac{1}{\sqrt{2}}\left[A+r'B(\cos\theta'+\sin\theta' e^{-i\varphi'})\right]r'^2\sin\theta' dr' d\theta' d\varphi'$$

由于$\int_0^{2\pi}e^{\pm i\varphi'}d\varphi'=0$，所以

$$I_1(\theta)=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty}e^{-iqr'\cos\theta'}e^{-\mu r'^2}\frac{1}{\sqrt{2}}(A+r'B\cos\theta')r^2\sin\theta' d\theta' dr'$$

积出θ'部分

$$I_1(\theta)=-\frac{2m}{\hbar^2 q}\frac{A}{\sqrt{2}}\int_0^{\infty}r'e^{-\mu r'^2}\sin qr' dr'-\frac{2mi}{\hbar^2 q}\frac{3}{\sqrt{2}}\int_0^{\infty}r'^2 e^{-\mu r'^2}\cos qr' dr'$$

$$+\frac{2mi}{\hbar^2 q^2}\frac{B}{\sqrt{2}}\int_0^{\infty}r'e^{-\mu r'^2}\sin qr' dr'$$

用复变函数方法可算得

$$f(\mu,\ q)=\int_0^{\infty}e^{-\mu r'^2}\cos qr' dr'=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\mu}}\exp\left(-\frac{q^2}{4\mu}\right)$$

$$\frac{\partial f}{\partial q}=-\int_0^{\infty}r'e^{-\mu r'^2}\sin qr' dr'=-\frac{q}{4\mu}\sqrt{\frac{\pi}{\mu}}\exp\left(-\frac{q^2}{4\mu}\right)$$

故有

$$\int_0^{\infty}r'e^{-\mu r'^2}\sin qr' dr'=\sqrt{\frac{\pi}{\mu}}\cdot\frac{q}{4\mu}\exp\left(-\frac{q^2}{4\mu}\right)$$

又有

$$\frac{\partial f}{\partial\mu}=-\int_0^{\infty}r'^2\mathrm{e}^{-\mu r'^2}\cos qr'\mathrm{d}r'$$

$$=\sqrt{\frac{\pi}{\mu}}\left(-\frac{1}{4\mu}\right)\exp\left(-\frac{q^2}{4\mu}\right)+\frac{q^2}{8\mu^2}\sqrt{\frac{\pi}{\mu}}\exp\left(-\frac{q^2}{4\mu}\right)$$

$$\int_0^{\infty}r'^2\mathrm{e}^{-\mu r'^2}\cos qr'\mathrm{d}r'=\frac{1}{4\mu}\sqrt{\frac{\pi}{\mu}}\exp\left(-\frac{q^2}{4\mu}-\frac{q^2}{8\mu^2}\right)\sqrt{\frac{\pi}{\mu}}\exp\left(-\frac{q^2}{4\mu}\right)$$

从而

$$I_1(\theta)=-\frac{2m}{\hbar^2q}\cdot\frac{A}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{\pi}{\mu}}\frac{q}{4\mu}\exp\left(-\frac{q^2}{4\mu}\right)-\frac{2m\mathrm{i}}{\hbar^2q}\cdot\frac{B}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{\pi}{\mu}}\exp\left(-\frac{q^2}{4\mu}\right)\left(\frac{1}{4\mu}-\frac{q^2}{8\mu^2}\right)$$

$$+\frac{2m\mathrm{i}}{\hbar^2q^2}\cdot\frac{B}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{\pi}{\mu}}\exp\left(-\frac{q^2}{4\mu}\right)\cdot\frac{q}{4\mu}$$

$$=-\frac{mA}{2\hbar\mu}\sqrt{\frac{\pi}{2\mu}}\exp\left(-\frac{q^2}{4\mu}\right)+\mathrm{i}\frac{2mB}{\hbar^2q}\sqrt{\frac{\pi}{2\mu}}\exp\left(-\frac{q^2}{4\mu}\right)\frac{q^2}{8\mu^2}$$

$$=\sqrt{\frac{\pi}{2\mu}}\cdot\frac{m}{2\hbar^2\mu}\left(-A+\mathrm{i}\frac{Bq}{2\mu}\right)\exp\left(-\frac{q^2}{4\mu}\right)$$

所以

$$\frac{\partial\sigma_{\uparrow}}{\partial\Omega}=|I_1(\theta)|^2=\frac{\pi m^2}{8\mu^3\hbar^4}\exp\left(-\frac{q^2}{2\mu}\right)\left(A^2+\frac{q^2B^2}{4\mu^2}\right)$$

类似可得

$$I_2(\theta)=-\frac{mA}{2\hbar^2\mu}\sqrt{\frac{\pi}{2\mu}}\exp\left(-\frac{q^2}{4\mu}\right)-\mathrm{i}\frac{mBq}{4\hbar^2\mu^2}\sqrt{\frac{\pi}{2\mu}}\exp\left(-\frac{q^2}{4\mu}\right)$$

$$\frac{\partial\sigma_{\downarrow}}{\partial\Omega}=|I_2(\theta)|^2=\frac{\mu m^2}{8\mu^3\hbar^4}\exp\left(-\frac{q^2}{2\mu}\right)\left(A^2+\frac{q^2B^2}{4\mu^2}\right)$$

式中，$q=\dfrac{2p}{\hbar}\sin\dfrac{\theta}{2}$.

对 $\psi_-=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$ 计算可得与上面相同的结果.

7.45　入射粒子 P_2 被处于束缚态的粒子 P_1 在相互作用势 $V(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')=V_0b^3\delta^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ 下的散射振幅

题 7.45　一无自旋带电粒子 P_1 束缚在一球对称态中，波函数为

$$\psi_1(r)=(\pi a)^{-3/2}\mathrm{e}^{-r^2/2a^2}.$$

若一无自旋非相对论入射粒子 P_2 与 P_1 间通过势 $V(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')=V_0b^3\delta^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ 相互作用，计算第一级 Born 近似下，P_2 被上述 P_1 束缚态弹性散射的振幅(可以不必管整体的归一化)假定 P_1 很重，以致其反冲能量可忽略，描绘出被散射的入射粒子的角分布 $\mathrm{d}\sigma(\theta)/\mathrm{d}\Omega$ 的形状. 该

形状怎样随入射能改变？怎样用它来确定 P_1 束缚态的尺度？是什么确定了测量该尺度所需要的 P_2 的最小能量？

解 由于 P_1 很重，所以 P_2 的 Schrödinger 方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\rho_1(\boldsymbol{r}')V_0b^3\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\right]\psi(\boldsymbol{r})=E\psi(\boldsymbol{r})$$

即

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V_0b^3\rho_1(\boldsymbol{r})\right)\psi(\boldsymbol{r})=E\psi(\boldsymbol{r})$$

式中，$\rho_1(\boldsymbol{r})=|\psi_1(\boldsymbol{r})|^2$ 是粒子 P_1 在 $\boldsymbol{r}$ 处的概率密度，m 是 P_2 的质量，由 Born 近似得

$$f(\theta)=-\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^{\infty}r'\cdot V_0b^3\rho_1(r')\sin qr'\mathrm{d}r'$$

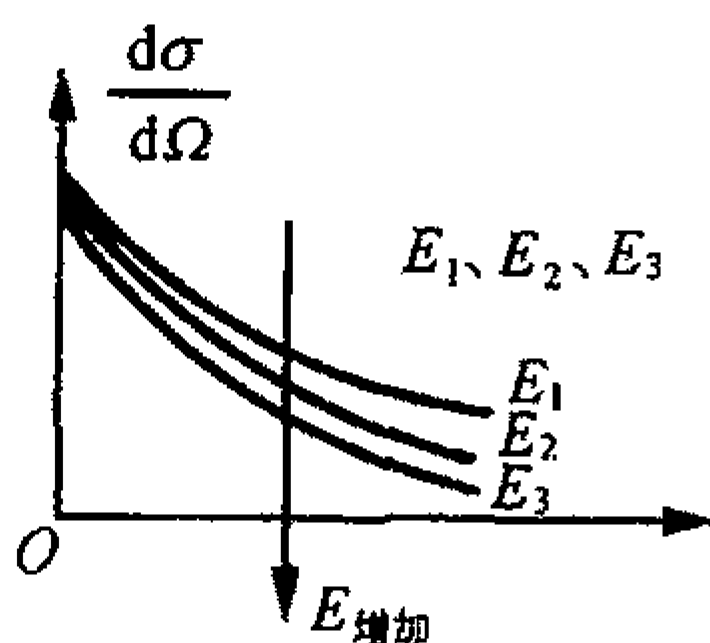
所以

$$f(\theta)\propto\frac{1}{q}\left(\frac{b}{a}\right)^3\int_0^{\infty}r'\exp\left(-\frac{r'}{a^2}\right)\sin qr'\mathrm{d}r'\propto\times b^3\exp\left[-\frac{1}{4}(qa)^2\right]$$

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}=|f(\theta)|^2=\sigma_0\exp\left[-\frac{1}{2}(qa)^2\right]$$

$$=\sigma_0\exp\left[-2(ka)^2\sin^2\frac{\theta}{2}\right]$$

式中，$\sigma_0=\sigma(\theta=0)$ 与 a 无关，$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}$ 的形状如题图 7.45 所示.



题图 7.45

当入射能量增加时，$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}$ 随 θ 增加而很快地减小. 由上式可得

$$\ln\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}=-2k^2a^2\sin^2\frac{\theta}{2}+c$$

绘出 $\ln\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}-\sin^2\frac{\theta}{2}$ 图，根据此直线的斜率即可定出 a.

从 $\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}$ 的表达式来看，入射能量 E 似乎无什么限制，但我们是用 Born 近似得到它的，所以 Born 近似的适用条件决定了测量该尺度所需要的最小能量.

Born 近似要求

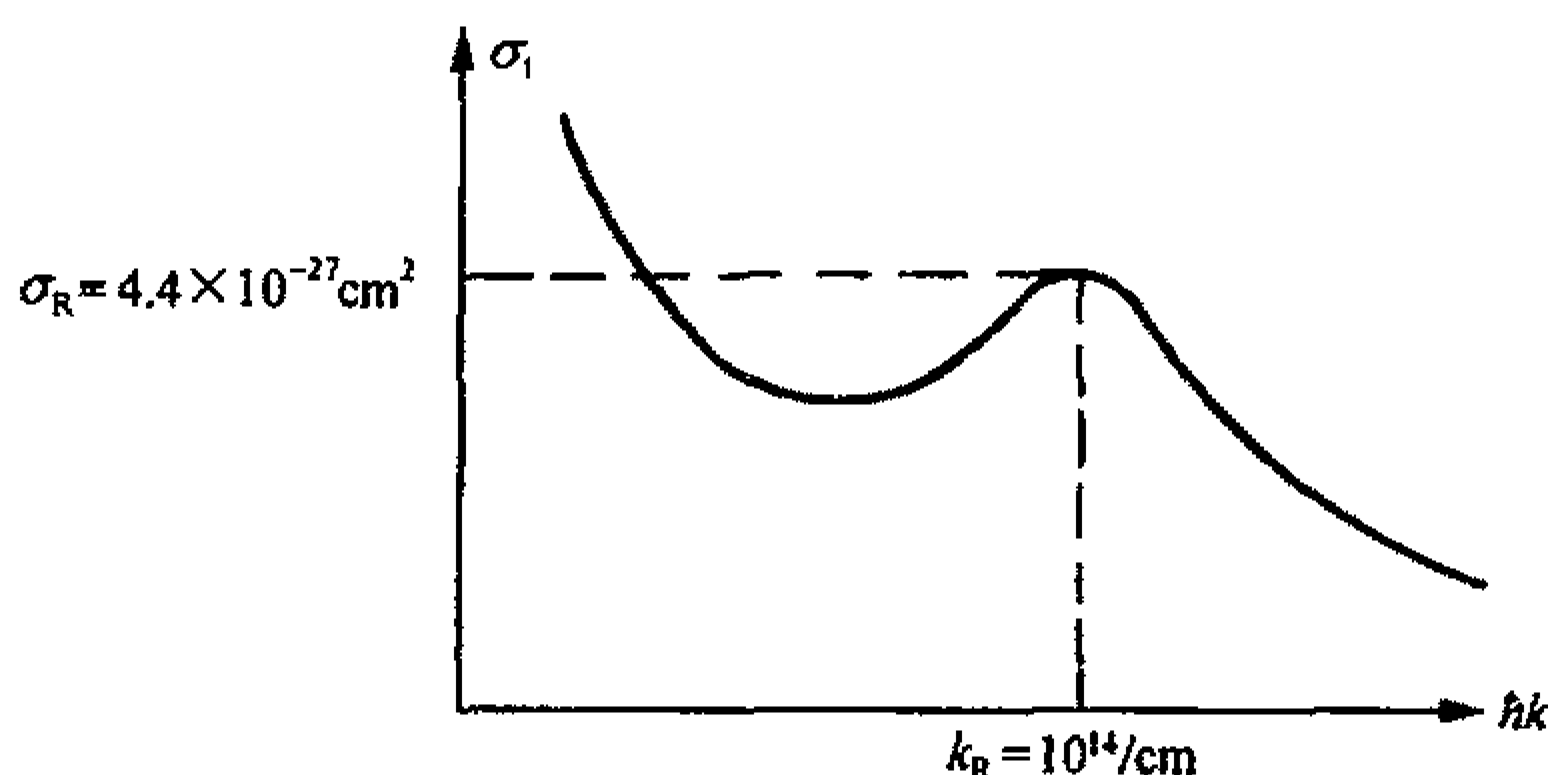
$$\frac{\hbar^2 k}{ma}\gg|V|\sim V_0\left(\frac{b}{a}\right)^3$$

所以

$$k_{\min} \sim \frac{mb^3V_0}{\hbar^2a^2}$$

7.46 已知弹性散射总截面，求共振角动量与共振时$\theta=180^\circ$的微分散射截面

题 7.46 考虑一个弹性散射实验$a+x\to a+x$，其中x远重于a(不考虑两者的自旋). 实验结果中总散射截面σ_t对$\hbar k$的依赖关系可见题图 7.46，发现在$k=k_R=10^{14}/\text{cm}$处，总散射截面有一共振峰，此时$\sigma_t=\sigma_R=4.4\times10^{-27}\text{cm}$，且共振时，从各个角度$\theta$都可以观察到散射效应，除了$\theta=90^\circ$之外(在这个角度上散射消失). 在远离共振区时，$\sigma_t$是各向同性的. 试求：(1) 共振的角动量$J$是多少？(2) 计算在共振时，在$\theta=180^\circ$方向的微分散射截面的近似值.



题图 7.46

解 (1) 我们用分波法计算此题. 共振与一确定的分波相联系，每个分波的角动量由相应的角量子数l确定，每个分波的角分布由勒让德多项式P_l描述. 由本题条件可知共振时除了$\theta=\dfrac{\pi}{2}$处无散射，其余任何方向都有散射，由此可知角量子数$l=1$，因为只有P_1满足这个条件，因此角量子数$l=1$，角动量$J^2=2\hbar^2$.

(2) 由分波法可知

$$f_k(\theta)=\frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta l}\sin\delta_l P_l(\cos\theta) \tag{1}$$

$$\sigma(\theta)=|f_k(\theta)|^2$$

$$\sigma_t=\frac{4\pi}{k_2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l \tag{2}$$

由于共振时，截面是各向同性的可知，这时在$f(\theta)$中只有$l=0$的分波存在. 因此考虑共振时的总截面时，我们只考虑$l=0$、1 两个分波，这时由式(2)可知，

$$\sigma_R=\frac{4\pi}{k^2}(\sin^2\delta_0+3)$$

导出上公式时，用到对于共振峰相应的$\delta_1=\dfrac{\pi}{2}$. 由上式可得$\sin^2\delta_0$，即

$$\sin^2\delta_0=\left(\frac{k_R^2\sigma_R}{4\pi}-3\right)\approx\frac{1}{2}$$

将 $\sin\delta_0$，$\sin\delta_1$ 代入式(1)，然后取模方可得

$$\sigma_R(\theta)=\frac{1}{k_R^2}\left(9-5\sin^2\delta_0\right)\approx 6.5\times10^{-28}\text{cm}^2$$

7.47 低能中子被一核子系统散射求散射长度

题 7.47 (1) 低能中子被一核子系统散射，核的自旋 S_1(不为 0). 若 $\boldsymbol{S}_1$ 和 $\boldsymbol{S}_2$ 分别为核子与中子的自旋角动量算符(以 $\hbar$ 为单位)，证明算符 $\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2$ 的本征值是

$$\frac{1}{2}S_1,\quad 当\ j=S_1+\frac{1}{2};\qquad -\frac{1}{2}(S_1+1),\quad 当\ j=S_1-\frac{1}{2}$$

上面 j 为核子与中子系统的总自旋.

(2) 设中子散射长度算符为

$$b=A+B\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2$$

式中，A，B 是常数，证明 A，B 分别为

$$A=\frac{(S_1+1)b^++S_1b^-}{2S_1+1}$$

$$B=\frac{2(b^+-b^-)}{2S_1+1}$$

式中，b^+ 和 b^- 分别为 $j=S_1+\dfrac{1}{2}$ 和 $j=S_1-\dfrac{1}{2}$ 时 b 的本征值，即散射长度.

(3) 由此证明，当中子波长与氢原子的两个质子间距相比足够长时，对于氢分子(总自旋量子数为 1)和氢分子(总自旋为零)的总散射截面分别为

$$\sigma_1=\frac{4\pi}{9}\left[(3b^++b^-)^2+2(b^+-b^-)^2\right]$$

$$\sigma_2=\frac{4\pi}{9}(3b^++b^-)^2$$

这里 b^+ 和 b^- 分别是对固定质子的三重态散射长度和单态散射长度(对一个氢分子中的质子的散射长度是固定散射长度的 $\dfrac{2}{3}$ 倍，原因是两者折合质量不同)

解 (1) 因为 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2$，所以有

$$\boldsymbol{J}^2=(\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2)\cdot(\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2)=\boldsymbol{S}_1^2+\boldsymbol{S}_2^2+2\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2$$

若 ψ 是 $\boldsymbol{J}^2$，$\boldsymbol{S}_1^2$，$\boldsymbol{S}_2^2$ 的本征态，本征值分别为 $j(j+1)$，$S_1(S_1+1)$，$S_2(S_2+1)$，则有

$$\begin{aligned}\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2\psi&=\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{J}^2-\boldsymbol{S}_1^2-\boldsymbol{S}_2^2\right)\psi\\&=\frac{1}{2}\left[j(j+1)-S_1(S_1+1)-S_2(S_2+1)\right]\psi\end{aligned}$$

因为中子自旋$S_2=\frac{1}{2}$，所以$j=S_1\pm\frac{1}{2}$，代入上式有

$$\frac{1}{2}\left[j(j+1)-S_1(S_1+1)-S_2(S_2+1)\right]=\begin{cases}\frac{1}{2}S_1, & j=S_1+\frac{1}{2}\\ -\frac{1}{2}(S_1+1), & j=S_1-\frac{1}{2}\end{cases}$$

(2) 设$|+\rangle$为b的本征值为b^+的本征态，则有

$$b|+\rangle=(A+B\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2)|+\rangle=\left(A+\frac{1}{2}S_1B\right)|+\rangle=b^+|+\rangle$$

即

$$A+\frac{1}{2}S_1B=b^+ \tag{1}$$

类似有

$$A-\frac{1}{2}(S_1+1)B=b^- \tag{2}$$

由式(1)，式(2)，可得

$$A=\frac{(S_1+1)b^++S_1b^-}{2S_1+1}$$

$$B=\frac{2(b^+-b^-)}{2S_1+1}$$

(3) 当核子系统为一个质子时$S_1=\frac{1}{2}$，所以有

$$A=\frac{1}{4}(3b^++b^-),\qquad B=b^+-b^-$$

当中子被氢分子散射时，每个质子都是各自的球对称散射波的中心. 当中子波长比两个质子间距长时，两个散射波是同相位的，因此分子的散射长度算符是两个质子散射长度算符之和，即

$$b_{\text{mol}}=2A+B\boldsymbol{S}_{分}\cdot\boldsymbol{S}_2$$

这里$B\boldsymbol{S}_{分}$两个质子的总自旋算符，它的本征值对于氩分子来说为1，对氢分子来说为0. 由(1)可知，$\boldsymbol{S}_{分}\cdot\boldsymbol{S}_2$的本征值为$\frac{1}{2}\left[j(j+1)-S_{分}(S_{分}-1)-S_2(S_2+1)\right]$，这里$j$是氢分子与中子的总自旋. 所以对氢分子来说，$S_{分}=1$，$j=\frac{3}{2}$或$\frac{1}{2}$，这时$\boldsymbol{S}_{分}\cdot\boldsymbol{S}_2$的本征值是

$$\frac{1}{2}\left[j(j+1)-S_{分}(S_{分}+1)-S_2(S_2+1)\right]=\begin{cases}\frac{1}{2}, & j=\frac{3}{2}\\ -1, & j=\frac{1}{2}\end{cases}$$

当中子被氢分子散射时，氢分子可以处于两个j值的所有态，每个j值的简并度为$2j+1$，即当$j=\frac{3}{2}$时，简并度为4；当$j=\frac{1}{2}$时，简并度为2. 因此$\boldsymbol{S}_{分}\cdot\boldsymbol{S}_2$的平均本征值必须经过加

权平均后获得

$$\langle \boldsymbol{S}_{分} \cdot \boldsymbol{S}_2 \rangle = \frac{1}{6} \times \left[\left(4 \times \frac{1}{2} \right) - (2 \times 1) \right] = 0$$

同样可求出$\left(\boldsymbol{S}_{分} \cdot \boldsymbol{S}_2 \right)^2$的平均本征值为

$$\left\langle \left(\boldsymbol{S}_{分} \cdot \boldsymbol{S}_2 \right)^2 \right\rangle = \frac{1}{6} \times \left[\left(4 \times \frac{1}{4} \right) + (2 \times 1) \right] = \frac{1}{2}$$

综合上述结果，由于测量的微分散射截面是$(b_{\mathrm{mol}})^2$的平均本征值，所以对于氢分子而言，有

$$\begin{aligned}
\left\langle (b_{\mathrm{mol}})^2 \right\rangle &= \left\langle \left(2A + B\boldsymbol{S}_{分} \cdot \boldsymbol{S}_2 \right)^2 \right\rangle \\
&= 4A^2 + 4AB \langle \boldsymbol{S}_{分} \cdot \boldsymbol{S}_2 \rangle + B^2 \left\langle \left(\boldsymbol{S}_{分} \cdot \boldsymbol{S}_2 \right)^2 \right\rangle \\
&= \frac{1}{4}(3b^+ + b^-)^2 + \frac{1}{2}(b^+ - b^-)^2
\end{aligned} \tag{3}$$

类似对于氢分子，$\boldsymbol{S}_{分} = 0$，所以有

$$\left\langle (b_{\mathrm{mol}})^2 \right\rangle = 4A^2 = \frac{1}{4}(3b^+ + b^-)^2 \tag{4}$$

因为总散射截面是$\left\langle (b_{\mathrm{mol}})^2 \right\rangle$的 4π倍，同时上面公式中的b^+，b^-都是一个固定质子的固定散射长度，考虑到氢分子中的每个质子散射长度是固定质子散射长度的$\frac{2}{3}$，因此有氢分子的散射总截面σ_t为

$$\sigma_t = \frac{16\pi}{9} \left\langle (b_{\mathrm{mol}})^2 \right\rangle$$

将式(3)，式(4)代入上式，即得到所求证的结果.

第8章　含时近似方法与跃迁

8.1　关于吸收或发射一个光子的原子态在电偶极作用时的选择定则

题 8.1　(1) 对于吸收或发射一个光子的原子态. 叙述电偶极选择定则. (2) 用光子的轨道角动量，自旋，螺旋度和宇称解释这个选择定则. (3) 用 Bohr 模型和经典公式

$$P=\frac{2}{3}\frac{q^2}{c^3}\dot{V}^2\,(\text{c. g. s 单位})$$

对氢原子 2p 态寿命作半径典估计. 用 e, $\hbar$, c, a 和 ω 表示你的结果. P 是电荷为 q 加速度为 $\dot{V}$ 的粒子的辐射功率. a 是 Bohr 半径. ω 是圆轨道上的角速度. (4) 由(3)的答案, 2p 态宽度为多少电子伏特?

解　(1) 选择定则为

$$\Delta l=\pm 1,\qquad \Delta m=\pm 1,\ 0$$

(2) 光子轨道角动量为 0，自旋为 1，螺旋度为 ± 1，宇称为"$-$".

由角动量守恒，得

$$\Delta l=0,\ \pm 1,\qquad \Delta m=\pm 1,\ 0$$

由宇称守恒，得

$$(-1)^l=-(-1)^{l'}\qquad (l\neq l')$$

所以

$$\Delta l=\pm 1,\qquad \Delta m=\pm 1,\ 0$$

(3) 圆轨道

$$\left|\dot{V}\right|=r\omega^2,\qquad \omega^2=\frac{e^2}{mr^3}$$

2p 态 $n=2$，根据平均 $r=\frac{1}{2}\left[3n^2-l(l+1)\right]a_0$，知 $r=5a_0$，辐射功率为

$$P=\frac{50}{3}\cdot\frac{e^2a^2\omega^4}{c^3}$$

跃迁到基态，能级差为

$$\Delta E=\frac{3e^2}{8a_0}$$

$$t=\frac{\Delta E}{P}=\left(\frac{3}{20}\right)^2\frac{c^3}{a_0^3\omega^4}=\left(\frac{75}{4}\right)^2\frac{m^2a_0^3c^3}{e^4}$$

$$\approx 2.2\times 10^{-8}\text{s}$$

(4)

$$\Gamma=\frac{\hbar}{t}=\left(\frac{20}{3}\right)^2\frac{a_0^3\omega^4\hbar}{c^3}=3.0\times 10^{-8}\text{eV}$$

8.2　无限深势阱中处于$n=1$态的电子在$E(t)$作用下跃迁到$n=2,3$的概率

题 8.2　一电子处在宽度从$x=-\frac{a}{2}$到$x=\frac{a}{2}$的一维无限深方势阱的$n=1$本征态. $t=0$时在x方向加一均匀电场E，直至$t=\tau$时撤去，利用含时微扰论计算在$t>\tau$时电子分别处于$n=2$及$n=3$的概率P_2和P_3. 假设$\tau \ll \frac{\hbar}{E_1-E_2}$. 指出为使含时微扰有效，对题给参数有什么要求.

解

$$V=\begin{cases}0, & |x|\leqslant \frac{a}{2}\\ \infty, & 其他\end{cases}$$

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi n}{a}\left(\frac{a}{2}+x\right)$$

$$E_n=\frac{\hbar^2\pi^2n^2}{2ma^2},\qquad n=1,2,\cdots$$

$$H'=eEx$$

$$\langle n_2|H'|n_1\rangle=\frac{2}{a}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}\sin\frac{n_1\pi}{a}\left(x+\frac{a}{2}\right)\sin\frac{n_2\pi}{a}\left(x+\frac{a}{2}\right)(eEx)\mathrm{d}x$$

$$=\frac{eE}{a}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}\left[\cos\frac{(n_1-n_2)}{a}\pi\left(x+\frac{a}{2}\right)-\cos\frac{(n_1+n_2)}{a}\pi\left(x+\frac{a}{2}\right)\right]x\mathrm{d}x$$

$$=\frac{eE}{a}\left\{\frac{a^2}{(n_1-n_2)^2\pi^2}\left[(-1)^{n_1-n_2}-1\right]-\frac{a^2}{(n_1+n_2)^2\pi^2}\left[(-1)^{n_1+n_2}-1\right]\right\}$$

$$=\frac{4eEa}{\pi^2}\cdot\frac{n_1n_2}{(n_1^2-n_2^2)^2}\left[(-1)^{n_1+n_2}-1\right]$$

$$\omega_{n_2n_1}=\frac{1}{\hbar}(E_{n_2}-E_{n_1})=\frac{\hbar\pi^2}{2ma^2}(n_2^2-n_1^2)$$

$$C_{k'k}(\tau)=\frac{1}{i\hbar}\int_0^{\tau}H'_{k'k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{k'k}\tau}\mathrm{d}t$$

$$=\frac{1}{\hbar}H'_{k'k}(1-\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{k'k}\tau})\frac{1}{\omega_{k'k}}$$

对于$1\to 2$

$$\langle 2|H'|1\rangle=-\frac{16eEa}{9\pi^2}\qquad \omega_{21}=\frac{3\hbar\pi^2}{2ma^2}$$

得

$$P_2 = |C_{21}(\tau)|^2 = \frac{1}{\hbar^2\omega_{21}^2}H_{21}'^2(1-e^{i\omega_{21}\tau})(1-e^{-i\omega_{21}\tau})$$

$$= \left(\frac{16a^2}{9\pi^2}\right)^3\left[\frac{eEm}{\hbar^2\pi}\sin\left(\frac{3\hbar\pi^2}{4ma^2}\tau\right)\right]^2$$

对于$1\to 3$，$\langle 3|H'|1\rangle = 0$

$$P_3 = |C_{31}(\tau)|^2 = 0$$

对于E很小及$\tau \ll \frac{\hbar}{E_1 - E_2}$，即$\Delta E$充分小，微扰论适用.

8.3 一维势箱的长度突变

题 8.3 一个质量为m的粒子被置于一个长度为l的一维势箱中. 其本征态定义为

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin\frac{n\pi x}{l}, \quad 0 \leqslant x \leqslant l$$

$$E_n = \frac{1}{2m}\left(\frac{m\pi\hbar}{l}\right)^2, \quad n = \pm 1, \pm 2, \cdots$$

假设该粒子原来处于状态$|n\rangle$，而势箱的长度在时间$t \ll \hbar / E_n$内增加为$2l\,(0 \leqslant x \leqslant 2l)$. 在此之后该粒子处于能量为$E_n$的本征态的概率是多少?

解 考虑一维箱的长度从l增加到$2l$这一过程. 题设$t \ll h / E_n$，可见该过程经历的时间非常短，有理由设想箱中粒子的状态来不及作出响应. 因此，过程完成后粒子的波函数为

$$\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{l}}\sin\frac{n\pi x}{l}, & 0 \leqslant x \leqslant l \\ 0, & l < x \leqslant 2l \end{cases}$$

另一方面，在长度为$2l$的一维箱中，能量本征态和本征值分别为

$$\phi_{n'}(x) = \sqrt{\frac{1}{l}}\sin\frac{n'\pi x}{2l}, \quad 0 \leqslant x \leqslant 2l$$

$$E_{n'} = \frac{1}{2m}\left(\frac{n'\pi\hbar}{2l}\right)^2, \quad n' = \pm 1, \pm 2, \cdots$$

这时，对应于能量E_n的本征态是$\phi_{2n}(n' = 2n)$.

于是，所求的概率振幅为

$$A = \int_0^{2l} dx\phi_{2n}(x)\psi(x) = \frac{\sqrt{2}}{l}\int_0^l dx\sin^2\frac{n\pi x}{l} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

而概率为

$$P = |A|^2 = \frac{1}{2}$$

8.4 处于无限深势阱中的粒子，在壁突然变化时，态与动量的变化

题 8.4　一个位于0到l的无穷深势阱中有一粒子处于基态. $x=l$处的壁突然移动到$x=2l$. (1) 计算粒子处于扩展后盒子内基态的概率. (2) 求扩展后盒子中该粒子最可能占有的态. (3) 假设盒子$[0,l]$的壁突然解除，粒子原来处于基态，求自由了的粒子的动量分布.

解　(1) 扩展前体系波函数为

$$\psi(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{l}}\sin\dfrac{\pi x}{l}, & x\in[0,l]\\ 0, & \text{其他}\end{cases}$$

扩展后体系基态波函数为

$$\phi(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{1}{l}}\sin\dfrac{\pi x}{2l}, & x\in[0,2l]\\ 0, & \text{其他}\end{cases}$$

所求概率为

$$P_1=\left|\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\phi^*(x)\psi(x)\right|^2=\frac{32}{9\pi^2}$$

(2) 先计算第一激发态上发现粒子的概率

$$P_2=\left|\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\phi_2^*(x)\psi(x)\right|^2=\frac{1}{2}$$

$$\phi_2(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{1}{l}}\sin\dfrac{\pi x}{l}, & x\in[0,2l]\\ 0, & \text{其他}\end{cases}$$

所以粒子处于第一激发态的概率最大.

(3) 动量为p的自由粒子波函数为

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{ipx}$$

所以

$$\begin{aligned}\psi(p)&=\int\mathrm{d}x\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{ipx/\hbar}\psi(x)\\&=\int_0^l\mathrm{d}x\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-ipx/\hbar}\sqrt{\frac{2}{l}}\sin\frac{\pi x}{l}\\&=\frac{1}{\sqrt{\pi\hbar l}}\left[1+\mathrm{e}^{-ipl/\hbar}\right]\frac{l/\pi}{1-(pl/\hbar\pi)^2}\end{aligned}$$

动量的分布概率为

$$|\psi(p)|^2 = \frac{2\pi\hbar^3 l}{(\hbar^2\pi^2 - p^2l^2)^2}\left(1+\cos\frac{pl}{\hbar}\right).$$

8.5　处于$\frac{1}{2}kx^2$势中的粒子，在k突变后基态的变化

题 8.5　一个质量为m的粒子处于一维谐振子势阱中，$V_1 = \frac{1}{2}kx^2$. (1) 粒子最初处在基态. 弹性系数突然增倍($k \to 2k$)，这样新的势阱就是$V_2 = kx^2$. 测量粒子能量. 问发现粒子在新势阱V_2的基态的概率是多少? (2) 弹性系数和(1)中一样突然增倍，所以V_1突变为V_2，但是新势阱中粒子的能量没有被测量. 而是在经过了T时间后弹性系数突然回到了初值，问T为何值可以使粒子态完全回复到V_1阱的基态?

解　(1) k没有变化之前粒子的波函数为

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{m\omega_0}{\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2}m\omega_0 x2/\hbar}$$

k变后，若态仍处在新的势的基态，则

$$\psi'(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{m\omega_1}{\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2}m\omega_1 x2/\hbar}$$

这样跃迁矩阵元为

$$\langle\psi'|\psi\rangle = \int \frac{1}{\pi}\left(\frac{m}{\hbar}\right)^{1/2}(\omega_0\omega_1)^{1/4} e^{-\frac{1}{2}m\frac{(\omega_0+\omega_1)x2}{\hbar}}dx$$

$$= \frac{1}{\pi}\left(\frac{m}{\hbar}\right)^{1/2}(\omega_0\omega_1)^{1/4}\frac{\pi}{\sqrt{\frac{1}{2}\frac{m(\omega_0+\omega_1)}{\hbar}}}$$

$$= \frac{(\omega_1\omega_0)^{1/4}}{\sqrt{\frac{1}{2}(\omega_0+\omega_1)}}$$

当$k \to 2k$，那么$\omega_0 \to \omega_1 = \sqrt{2}\omega_0$

$$|\langle\psi'|\psi\rangle|^2 = \frac{(\omega_1\omega_0)^{1/2}}{\frac{1}{2}(\omega_0+\omega_1)} = \frac{(\sqrt{2}\omega_0^2)^{1/2}}{\frac{1}{2}(\sqrt{2}+1)\omega_0}$$

$$= \frac{2^{1/4}}{\frac{1}{2}(\sqrt{2}+1)} = 2\sqrt[4]{2}(\sqrt{2}-1)$$

所以，处在$\psi'(x)$的概率为$2\sqrt[4]{2}(\sqrt{2}-1)$.

(2) 不去测量能量就没有破坏量子态，$t=0$时$\psi(x,0)=\psi_0(x)$，$\psi_n(x)$是V_1的本征态. 按V_2的一套本征态展开

$$\psi(x,0) = \langle\psi'_m(x)|\psi_n\rangle|\psi'_m(x)\rangle,$$　　用了重复指标求和约定

这样有

$$\psi(x,t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}\psi(x,0)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}|\psi_m'(x)\rangle\langle\psi_m'(x)|\psi_0\rangle=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_m't/\hbar}\langle\psi_m'(x)|\psi_0\rangle|\psi_m'(x)\rangle$$

因 $\psi_0(x)$ 为偶宇称，所以

$$\langle\psi_m'(x)|\psi_0(x)\rangle\begin{cases}=0, & m=2n+1\\ \neq 0, & m=2n\end{cases}$$

这样有

$$|\psi(x,\tau)\rangle=|\psi_{2m}'(x)\rangle\langle\psi_{2m}'|\psi_0\rangle e^{-iE_{2m}'\tau/\hbar}$$

要使 $|\psi(x,\tau)\rangle=|\psi_0(x)\rangle$，只能使 $E_{2m}'\tau/\hbar=2\mathrm{N}\pi+C$(N 为自然数，$C$ 是常数).

对任何 m 值均满足才能达到，但

$$E_{2m}'=\left(2m+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_1'$$

所以要对任何 m 有

$$\left(2m+\frac{1}{2}\right)\omega_1'\tau=2N\pi+C$$

使 $C=\dfrac{1}{2}\omega'\tau$，有

$$2m\omega_1'\tau=2N\pi$$

所以

$$2\omega_1'\tau=2N'\pi\,,\qquad \tau=\frac{\pi}{\omega_1'}N\,,\qquad N=0,1,2,\cdots$$

即 $\tau=N\pi\sqrt{\dfrac{M}{2k}}$ 才可以使态 100%地变到 $\psi_0(x)$.

8.6　一维无限深势阱中的粒子，当墙突然撤除时，能量与动量分布

题 8.6　一个在 x 方向上运动的粒子被两堵位于 $x=0$ 和 $x=a$ 的墙束缚在中间，如果粒子处于基态，它的能量是多少？设想墙忽然被分开相距无穷远，粒子动量值在 p 到 $p+dp$ 间的概率是多少？这样粒子的能量是多少？如果结果与原先的基态能量不符，你如何看待有关能量守恒的问题？

解　初始时粒子被束缚在 $x=0$ 和 $x=a$ 之间，基态波函数

$$\psi_0=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{\pi x}{a}, & 0\leqslant x\leqslant a\\[2ex] 0, & \text{其他}\end{cases}$$

粒子的能量为 $\dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$.

当墙忽然被分开并相距无穷远，也即墙被瞬间完全拆除时，粒子的波函数在这瞬间来不及改变，仍保留为原来的形式. 但由于拆除墙之后的 Hamilton 量已不同于拆除前的，这个原来形式的波函数并不是新的拆除后的 Hamilton 量的本征态. 所以拆除后的问题是：把

上述基态波函数作为初条件，求解自由粒子$\left(H=\dfrac{p^2}{2m}\right)$的 Schrödinger 方程. 这个原来的阱中基态的波包要弥散，以至当$t\to\infty$时成为空间均匀的概率分布(但却处处为零).

于是这个初始的波包转到动量表象$(p=\hbar k)$，

$$\psi(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_0^a\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a}\mathrm{e}^{\mathrm{i}px}\mathrm{d}x=-\sqrt{\frac{a\pi}{\hbar}}\frac{1+\mathrm{e}^{\mathrm{i}pa}}{(pa)^2-\pi^2}$$

在将势阱完全撤除的瞬间，动量在$p\to p+dp$内的概率为

$$f(p)\mathrm{d}p=\left(|\psi(p)|^2+|\psi(-p)|^2\right)\mathrm{d}p=8\frac{a\pi}{\hbar}\frac{\cos^2\dfrac{pa}{2}\mathrm{d}p}{\left[(pa)^2-\pi^2\right]^2},\qquad p\neq 0$$

$$f(0)\mathrm{d}p=|\psi(0)|^2\,\mathrm{d}p=4\frac{a}{\pi^3\hbar}\mathrm{d}p$$

由于撤除后的系统的 Hamilton 量$\left(H=\dfrac{p^2}{2m}\right)$显然不含$t$，故其能量的平均值可用这个作为初始条件的波包计算，即

$$\overline{E}=\int_0^\infty\frac{\hbar^2k^2}{2m}8\frac{a\pi}{\hbar}\cdot\frac{\cos^2\left(\dfrac{pa}{2}\right)}{[(pa)^2-\pi^2]^2}\mathrm{d}(\hbar k)$$

$$=8\frac{\hbar^2}{2ma^2}\int_0^\infty\frac{y^2\cos^2\left(\dfrac{\pi y}{2}\right)}{(y^2-1)^2}\mathrm{d}y=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

这里利用了式中的定积分为$\dfrac{\pi^2}{8}$这一事实.

这就是说，在突然地，完全地撤除这种无限深方阱的过程中，系统能量不变. 这显然是对的，因为

撤除前：$\quad\langle\psi_0|H_{前}|\psi_0\rangle=\int_0^a\psi_0^*\dfrac{p^2}{2m}\psi_0\mathrm{d}x$

撤除后：$\quad\langle\psi(t)|H_{后}|\psi(t)\rangle=\langle\psi_0|\exp(\mathrm{i}H_{后}t/\hbar)H_{后}\exp(-\mathrm{i}H_{后}t/\hbar)|\psi_0\rangle$

$$=\langle\psi_0|H_{后}|\psi_0\rangle=\int_0^a\psi_0^*\frac{p^2}{2m}\psi_0\mathrm{d}x$$

是相等的. 当墙缓慢外移直至相距无穷远，或当墙并非无限高而突然完全撤除这两种情况下，由于粒子与墙的能量交换，撤除前后粒子能量均要发生改变.

8.7 带电谐振子在突加均匀电场中的跃迁概率

题 8.7 处于基态的一个带电谐振子上突然加上一个均匀电场，试求该谐振子受到此微扰后跃迁到激发态的概率.

解 加了均匀电场E之后，带电量为e的谐振子的势能为

$$V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2+eEx=\frac{m\omega^2}{2}(x-x_0)^2+A$$

式中，$x_0=eE/m\omega^2$，A 为常数.

由于微扰后的势能仍为谐振子势(只是平衡位置移动 x_0)，所以受微扰后振子的定态波函数为$\psi_k(x-x_0)$，有

$$\psi_k(x-x_0)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x-x_0)^2}H_n\left((x-x_0)\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right)$$

设初态波函数是未受微扰时的谐振子基态波函数$\psi_0(x)$，即

$$\psi_0(x)=\left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4}\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

则受微扰后跃迁到$\psi_k(x-x_0)$态的概率P_{k0}为

$$P_{k0}=\left|\int_{-\infty}^{\infty}\psi_k^*(x-x_0)\psi_0(x)\mathrm{d}x\right|^2$$

$$=\left|\frac{(-1)^k}{\sqrt{2^k\pi k!}}\mathrm{e}^{-\xi_0^2/2}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\xi\xi_0}\frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}\xi^k}\mathrm{e}^{-\xi^2+2\xi\xi_0}\mathrm{d}\xi\right|^2 \tag{1}$$

上式中$\xi=x\sqrt{m\omega/\hbar}$，$\xi_0=x_0\sqrt{m\omega/\hbar}$，并且考虑到

$$H_n(\xi)=(-1)^n\mathrm{e}^{\xi^2}\frac{\mathrm{d}^n(\mathrm{e}^{-\xi^2})}{\mathrm{d}\xi^n}$$

式(1)右边经过多次分步积分后积分式变为

$$\xi_0^k\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\xi^2+\xi\xi_0}\mathrm{d}\xi=\xi_0{}^k\!\sqrt{\pi}\mathrm{e}^{\xi_0^2/4} \tag{2}$$

将式(2)代入式(1)后，可得

$$P_{k0}=\frac{\overline{K}}{K!}\mathrm{e}^{-\overline{K}},\qquad \overline{K}=\frac{1}{2}\xi_0^2=(eE)^2/2m\hbar\omega^2 \tag{3}$$

作为量子数k的函数，式(3)是 Poisson 分布，其中$\overline{K}$是K的平均值.

当 E 很小时，$\overline{K}\ll 1$，微扰论适用，这时P_{k0}很小. 随 K 增大迅速衰减，最大概率为$P_{10}\approx\overline{K}$；当 E 很大时，$\overline{K}\gg 1$，激发振子产生的概率很大，该振子留在基态的概率只有$P_{00}=\mathrm{e}^{-\overline{K}}$.

8.8　基态原子受急剧冲撞后的激发概率

题 8.8　处于基态的原子的原子核，受到急剧冲撞后具有速度u，撞击时间为τ，假定τ既小于电子周期，又小于a/u(a为原子大小). 求该原子在冲撞下的激发概率.

解　冲撞后，原子具有速度 u，则在K'惯性系看(K'系为冲撞前、冲撞后的原子静止参照系)，由于冲撞时间τ很小($\tau\ll a/u$)，故可认为冲撞过程中原子位置几乎没有移动，因此冲撞后，K'系中的电子坐标与冲撞前参考系K中的电子坐标相等. 冲撞后的原子波函数(K'系中)为

$$\psi_0' = \psi_0 \exp\left(-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\sum_a \boldsymbol{r}_a\right)$$

式中，$\boldsymbol{q}=\dfrac{m\boldsymbol{u}}{\hbar}$，$\boldsymbol{r}_a$为各电子的坐标，而$\psi_0$为原子未动时的基态波函数. 式(8.8)可以展开为不同激发态的叠加，叠加系数的模平方即跃迁概率，因此有

$$P_{k0} = \left|\left\langle \psi_k \middle| \exp\left(-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\sum_a \boldsymbol{r}_a\right) \middle| \psi_0 \right\rangle\right|^2$$

式中，$|\psi_k\rangle$、$|\psi_0\rangle$都是相对K系的原子本征态. 特别当$qa \ll 1$时，积分函数中指数因子可以展开，只保留二项的话，再考虑到$|\psi_k\rangle$与$|\psi_0\rangle$的正交性，最后可得

$$P_{k0} = \left|\left\langle \psi_k \middle| \boldsymbol{q}\cdot\sum_a \boldsymbol{r}_a \middle| \psi_0 \right\rangle\right|^2$$

8.9 氢原子受到突然冲撞后激发和电离的总概率

题 8.9 求氢原子受到突然“冲撞”后激发和电离的总概率(参考上题).

解 激发和电离的总概率为 1 减去氢原子仍留在基态的概率，因此总概率可以如下计算

$$P = 1 - P_{00} = 1 - \left|\int \psi_0^2 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}V\right|^2 \tag{1}$$

式中，P_{00}为原子仍留在基态的概率. 将氢原子的基态波函数$\psi_0 = \dfrac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\mathrm{e}^{-r/a}$ (a = Bohr半径)代入式(1)中的积分部分，有

$$\begin{aligned}\int \psi_0^2 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}V &= \int \frac{1}{\pi a^3}\mathrm{e}^{-2r/a}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qr\cos\theta}r^2\mathrm{d}r\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi \\ &= \frac{1}{\left(1+\dfrac{1}{4}q^2a^2\right)^2}\end{aligned} \tag{2}$$

将式(2)代入式(1)，可得

$$P = 1 - P_{00} = 1 - \frac{1}{\left(1+\dfrac{1}{4}q^2a^2\right)^4}$$

当$qa \ll 1$时，$P \approx q^2a^2$趋于零；当$qa \gg 1$时，$P \approx 1-(2/qa)^8$趋于 1.

8.10 恒定微扰势作用下由$\psi_1^{(0)}$到$\psi_2^{(0)}$的跃迁概率

题 8.10 设有一系统，在$t=0$时刻处于两重简并能级的$\psi_1^{(0)}$态，在某一恒定微扰势V作用下发生跃迁，求t时刻该系统跃迁到同一能级的$\psi_2^{(0)}$态的概率.

解 设微扰势V在$\psi_1^{(0)}$、$\psi_2^{(0)}$上的矩阵元为V_{11}，V_{12}，V_{21}，V_{22}，即

$$V_{ij}=\left\langle\psi_i^{(0)}\left|V\right|\psi_j^{(0)}\right\rangle,\qquad i,j=1,2$$

则由久期方程

$$\begin{vmatrix} V_{11}-E^{(1)}, & V_{12} \\ V_{21}, & V_{22}-E^{(1)} \end{vmatrix}=0$$

可求出能量一级修正

$$E^{(1)}=\frac{1}{2}\left[(V_{11}+V_{22})\pm\hbar\omega^{(1)}\right]$$

式中，$\hbar\omega^{(1)}=\sqrt{(V_{11}-V_{22})^2+4\left|V_{12}\right|^2}$ 为两个修正后的能级差. 再由简并微扰论可得两个零级近似波函数

$$\begin{cases} \psi^{(0)}=C_1\psi_1^{(0)}+C_2\psi_2^{(0)}, & E^{(1)}=\frac{1}{2}\left[(V_{11}+V_{22})+\hbar\omega^{(1)}\right] \\ \psi'^{(0)}=C_1'\psi_1^{(0)}+C_2'\psi_2^{(0)}, & E^{(1)\prime}=\frac{1}{2}\left[(V_{11}+V_{22})-\hbar\omega^{(1)}\right] \end{cases}\tag{1}$$

其中

$$C_1=\left\{\frac{V_{12}}{2\left|V_{12}\right|}\left[1+\frac{V_{11}-V_{22}}{\hbar\omega^{(1)}}\right]\right\}^{1/2}$$

$$C_2=\left\{\frac{V_{12}}{2\left|V_{12}\right|}\left[1-\frac{V_{11}-V_{22}}{\hbar\omega^{(1)}}\right]\right\}^{1/2}$$

$$C_1'=\left\{\frac{V_{12}}{2\left|V_{12}\right|}\left[1-\frac{V_{11}-V_{22}}{\hbar\omega^{(1)}}\right]\right\}^{1/2}$$

$$C_2'=\left\{\frac{V_{12}}{2\left|V_{12}\right|}\left[1+\frac{V_{11}-V_{22}}{\hbar\omega^{(1)}}\right]\right\}^{1/2}$$

由逆变换可得

$$\psi_1^{(0)}=\frac{C_2'\psi^{(0)}-C_2\psi'^{(0)}}{C_1C_2'-C_1'C_2}$$

$$\psi_2^{(0)}=\frac{C_1'\psi^{(0)}-C_1\psi'^{(0)}}{C_1'C_2-C_1C_2'}$$

引入时间变化因子后，与时间有关的波函数为

$$\Psi(\boldsymbol{r},t)=\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E^{(0)}t}}{C_1C_2'-C_1'C_2}\left[C_2'\psi^{(0)}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E^{(1)}t}-C_2\psi'^{(0)}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E^{(1)\prime}t}\right]\tag{2}$$

当 $t=0$ 时，$\Psi(t)=\psi_1^{(0)}$. 将式(1)代入式(2)，$\Psi(t)$ 变成 $\psi_1^{(0)}$ 与 $\psi_2^{(0)}$ 的线性组合，$\psi_1^{(0)}$ 与 $\psi_2^{(0)}$ 前的系数与时间有关，而 $\psi_2^{(0)}$ 函数前系数的模的平方即为在 t 时刻跃迁到 $\psi_2^{(0)}$ 的概率，即

$$P_{21}=\frac{2|V_{12}|^2}{(\hbar\omega^{(1)})^2}\left[1-\cos\omega^{(1)}t\right]$$

由上式可知，此概率随时间以频率 $\omega^{(1)}$ 作振荡.

8.11　频率满足 $E_m^{(0)}-E_n^{(0)}=\hbar(\omega+\varepsilon)$（$\varepsilon$ 为小量）的周期性微扰对本征态的改变量

题 8.11　设有一周期性微扰 $V=F\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}+F^{\dagger}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}$，其频率 ω 满足 $E_m^{(0)}-E_n^{(0)}=\hbar(\omega+\varepsilon)$，$\varepsilon$ 是一个小量. 求 Schrödinger 方程本征值为 $E_m^{(0)}$ 和 $E_n^{(0)}$ 的本征态受这种微扰后的改变量.

解　受微扰后 Schrödinger 方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=(H_0+V)\Psi \tag{1}$$

令解表成以下求和形式

$$\Psi=\sum_k a_k\psi_k^{(0)} \tag{2}$$

式中，$\psi_k^{(0)}$ 满足下列方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi_k^{(0)}}{\partial t}=H_0\psi_k^{(0)}$$

将式(2)代入式(1)，得

$$\mathrm{i}\hbar\sum_k\psi_k^{(0)}\frac{\mathrm{d}a_k}{\mathrm{d}t}=\sum_k a_kV\psi_k^{(0)}$$

上式两边左乘 $\psi_m^{(0)*}$ 后，全空间积分，得

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}a_m}{\mathrm{d}t}=\sum_k V_{mk}(t)a_k \tag{3}$$

式中

$$\begin{aligned}V_{mk}(t)&=V_{mk}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{mk}t}\\&=F_{mk}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_{mk}-\omega)t}+F_{km}^{*}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_{mk}+\omega)t}\end{aligned}$$

很显然对式(3)积分时，随时间变化频率 $(\omega_{mk}-\omega)$ 越小的项越重要，故略去所有其他各项后，我们得到两个联立方程

$$\begin{cases}\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}a_m}{\mathrm{d}t}=F_{mn}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_{mn}-\omega)t}a_n=F_{mn}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varepsilon t}a_n\\ \mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}a_n}{\mathrm{d}t}=F_{mn}^{*}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon t}a_m\end{cases} \tag{4}$$

作变换代替

$$a_n\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varepsilon t}=b_n \tag{5}$$

式(4)变为

$$\mathrm{i}\hbar\dot{a}_m=F_{mn}b_n,\qquad \mathrm{i}\hbar(\dot{b}_n-\mathrm{i}\varepsilon b_n)=F_{mn}^{*}a_m \tag{6}$$

由上两式消去 a_m 后，得

$$\ddot{b}_n - \mathrm{i}\varepsilon\dot{b}_n + |F_{mn}|^2 b_n/\hbar^2 = 0$$

上式为常系数二阶微分方程，解出 b_n 后代入式(5)、式(6)可得到两套独立解

$$a_n = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_1 t}, \qquad a_m = -\frac{A\hbar\alpha_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_2 t}}{F_{mn}^*}$$

和

$$a_n' = B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha_2 t}, \qquad a_m' = \frac{B\hbar\alpha_2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha_1 t}}{F_{mn}^*}$$

式中，A、B 是常数，由归一化条件求出，$\alpha_1 = -\frac{\varepsilon}{2} + \Omega$，$\alpha_2 = \frac{\varepsilon}{2} + \Omega$，$\Omega = \sqrt{\frac{\varepsilon^2}{4} + |\eta|^2}$，$\eta = F_{mn}/\hbar$.

因此，在所给微扰作用下，解出两个独立解

$$\psi_1 = a_n\psi_n^{(0)} + a_m\psi_m^{(0)}$$

$$\psi_2 = a_n'\psi_n^{(0)} + a_m'\psi_m^{(0)}$$

通解设 $\Psi = C_1\psi_1 + C_2\psi_2$，假定该系统在 $t=0$ 时处于 $\Psi_m^{(0)}$ 态，由初始条件与归一化条件可定出 C_1，C_2，结果得到

$$\Psi = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\varepsilon t}{2}}\left(\cos\Omega t - \frac{\mathrm{i}\varepsilon}{2\Omega}\sin\Omega t\right)\psi_m^{(0)} - \frac{\mathrm{i}\eta^*}{\Omega}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\varepsilon t}{2}}\sin\Omega t\psi_n^{(0)} \tag{7}$$

由式(7)中 $\psi_n^{(0)}$ 前系数的模量的平方为

$$\frac{|\eta|^2}{2\Omega^2}(1-\cos 2\Omega t)$$

这正是在 t 时刻发现系统处于 $\psi_n^{(0)}$ 态的概率. 此概率以 2Ω 为频率振荡，概率值在 0 到 $|\eta|^2/\Omega^2$ 之间变化.

当 $\varepsilon = 0$ 时(严格共振)，概率变为 $\frac{1}{2}(1-\cos 2|\eta|t)$ 在 0~1 间周期性变化.

8.12　含时 $H(t)$ 下作绝热演化的系统的含时波函数及 Berry 相位

题 8.12　设含时系统 $H(t)$ 作绝热演化，初态为对应 $E(0)$ 的定态 $|\varphi(0)\rangle$. 由于演化无限缓慢，这时有 $|\varphi(t)\rangle$ 存在，使得下面准定态方程成立

$$H(t)|\varphi(t)\rangle = E(t)|\varphi(t)\rangle \tag{1}$$

(1) 证明此时初态为 $|\varphi(0)\rangle$ 的含时 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial|\psi(t)\rangle}{\partial t} = H(t)|\psi(t)\rangle \tag{2}$$

的解$|\psi(t)\rangle$可以表示为

$$|\psi(t)\rangle=\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t E(\tau)\mathrm{d}\tau\right\}\exp\{\mathrm{i}\gamma(t)\}|\varphi(t)\rangle \tag{3}$$

求出$\gamma(t)$的表达式.

(2) 这里相位$\gamma(t)$包括两种情况，平庸情况：$\gamma(t)$表达式是可积单值的，系统绝热演化一周返回$|\varphi(0)\rangle$时，$\gamma(\tau)=0$（τ为周期时间)；非平庸情况：$\gamma(t)$表达式是不可积的，多值的$\gamma(\tau)\neq 0$，这便是著名的 Berry 相位. 试分析平庸的$\gamma(t)$是否总是恒为零.

解　(1) 将式(3)代入式(2)，有

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\frac{\partial|\psi(t)\rangle}{\partial t}&=\mathrm{i}\hbar\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E(t)\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t E(\tau)\mathrm{d}\tau\right\}\exp\{\mathrm{i}\gamma(t)\}|\varphi(t)\rangle\right.\\&\quad+\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t E(\tau)\mathrm{d}\tau\right\}\cdot\mathrm{i}\frac{\partial\gamma(t)}{\partial t}\exp(\mathrm{i}\gamma(t))|\varphi(t)\rangle\\&\quad\left.+\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t E(\tau)\mathrm{d}\tau\right\}\exp(\mathrm{i}\gamma(t))\frac{\partial|\varphi(t)\rangle}{\partial t}\right\}\\&=H(t)|\psi(t)\rangle\end{aligned}$$

考虑到式(1)，上式第二个等号的左边第一项与右边的一项可以消去，故而有

$$\mathrm{i}\frac{\partial\gamma(t)}{\partial t}|\varphi(t)\rangle=-\frac{\partial}{\partial t}|\varphi(t)\rangle$$

用$\langle\varphi(t)|$左乘上式两边，考虑到$|\varphi(t)\rangle$的归一性，可得

$$\frac{\partial\gamma(t)}{\partial t}=\mathrm{i}\left\langle\varphi(t)\left|\frac{\partial}{\partial t}\right|\varphi(t)\right\rangle$$

对上式积分有

$$\gamma(t)=\mathrm{i}\int_0^t\left\langle\varphi(\tau)\left|\frac{\partial}{\partial\tau}\right|\varphi(\tau)\right\rangle\mathrm{d}\tau \tag{4}$$

(2) 因为$\langle\varphi(t)|\varphi(t)\rangle=1$为常数，所以有

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial\tau}\langle\varphi(\tau)|\varphi(\tau)\rangle&=\left[\frac{\partial}{\partial\tau}\langle\varphi(\tau)|\right]|\varphi(\tau)\rangle+\left\langle\varphi(\tau)\left|\frac{\partial}{\partial\tau}\right|\varphi(\tau)\right\rangle\\&=0\end{aligned}$$

在一维情况下，定态波函数总可以表示为实函数，所以上式右边两项相等，故而有

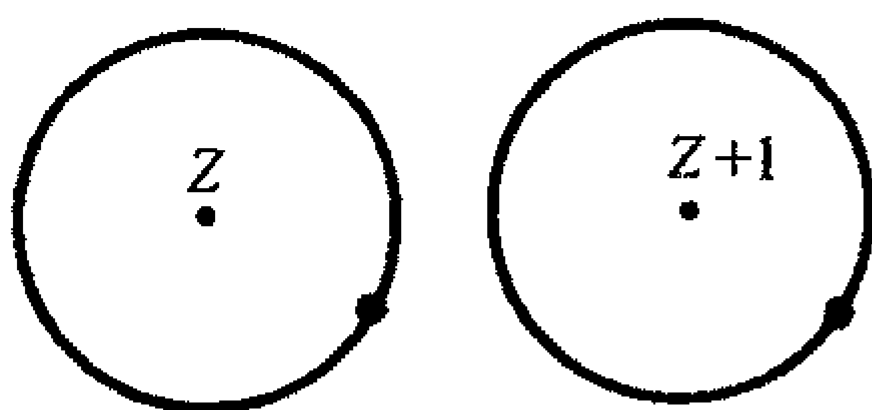
$$\left\langle\varphi(\tau)\left|\frac{\partial}{\partial\tau}\right|\varphi(\tau)\right\rangle=0$$

由于式(4)中的被积函数为零，故$\gamma(t)$恒为零.

8.13　原子核β衰变后，电子仍留在 K 轨道上的概率

题 8.13　如题图 8.13 所示由于β衰变，一原子核的电量突然由 Z 变为 Z+1. 问β衰变后，原来在 K 轨道的电子仍留在 K 轨道上的概率是多少？忽略所有的电子之间的

相互作用.



题图 8.13

解　在一个带电为 Z 的原子中，K 电子的波函数有这样的形式

$$\psi_Z(r)=NZ^{3/2}\mathrm{e}^{-rz/a}$$

式中，$4\pi Z^3\int_0^\infty r^2N^2\mathrm{e}^{-2Zr/a}\mathrm{d}r=1$. 所以，$K$ 电子留在原轨道的概率为

$$\left|\langle\psi_{z+1}(r)|\psi_z(r)\rangle\right|^2=\frac{\left(1+\dfrac{1}{Z}\right)^3}{\left(1+\dfrac{1}{2Z}\right)^6}$$

8.14　氚β衰变后仍留在基态的概率

题 8.14　氚(^{3}H)可放出β粒子而自发衰变成 ^{3}He 离子(^{3}He$^+$). 电子离开如此之快，整个过程只显示出核电荷从 $Z=1$ 变到 $Z=2$. 计算 He$^+$留在基态的概率.

解　He$^+$的基态波函数为

$$\psi_{1s}^{\mathrm{He}^+}=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{2}{a}\right)^{3/2}\mathrm{e}^{-2r/a}$$

式中，a 是 Bohr 半径. 设 ^{3}H 体系的波函数是 $\varphi(r)$，由于β衰变过程很快，当 ^{3}H 衰变成 ^{3}He$^+$ 时，体系的波函数没有发生变化，所以发现 ^{3}He$^+$处于基态的概率为

$$p=\frac{\left|\langle\psi_{1s}^{\mathrm{He}^+}|\varphi\rangle\right|^2}{\left|\langle\varphi|\varphi\rangle\right|^2}$$

本题设 ^{3}H 处于基态

$$\varphi(\boldsymbol{r})=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a}\right)^{3/2}\mathrm{e}^{-r/a}$$

$$p=\left|4\left(\frac{2}{a^2}\right)^{3/2}\int_0^\infty r^2\exp\left(-\frac{3r}{a}\right)\mathrm{d}r\right|^2$$

$$=\frac{2^7}{3^6}\left|\int_0^\infty x^2\mathrm{e}^{-x}\mathrm{d}x\right|^2=\frac{2^9}{3^6}\approx 70.2\%$$

8.15 氚β衰变后，处于 1s 或 2p 态的概率

题 8.15 氚(质量数为 3 的氢)具有β放射性，并且衰变成质量数为 3 的氦核(^{3}He)，同时放出一个电子和一个中微子. 假设原先束缚在氚原子中的电子处于基态，并且该电子与衰变产生的 ^{3}He 核结合在一起形成 $^3He^+$离子. (1) 计算 $^3He^+$离子处于 1s 态的概率. (2) $^3He^+$离子处于 2p 态的概率是多少?

解 不考虑氢原子体系约化质量与氦离子体系约化质量的微小差异，$^3He^+$离子的 Bohr 半径为$a_0/2$，于是

$$\psi_{1s}^{H}=Y_{00}\frac{2}{a_0^{3/2}}e^{-r/a},\qquad \psi_{1s}^{He^+}=Y_{00}\frac{2}{\left(\dfrac{a_0}{2}\right)^{3/2}}e^{-2r/a_0}$$

$$\psi_{2p}^{He^+}=Y_{1m}\frac{1}{2\sqrt{6}(a_0/2)^{3/2}}\frac{2r}{a_0}e^{-r/a_0},\qquad m=1,\ 0,\ -1$$

(1) 发现 He$^+$离子处于 1s 态的概率振幅为

$$A=\int\psi_{1s}^{*He^+}\psi_{1s}^{H}d^3x=\frac{2^{\tau/2}}{a_0^3}\int_0^{\infty}drr^2e^{-3r/a_0}=\frac{16\sqrt{2}}{27}$$

概率为

$$|A|^2=2\left(\frac{16}{27}\right)^2=0.7023$$

(2) 根据球谐函数正交性，即知发现 $^3He^+$离子处于 2p 态的概率为零.

8.16 沿 x 方向极化的热中子束通过一磁场 $\boldsymbol{B}$，证明自旋是 $\boldsymbol{S}_\rho$ 的本征态($\boldsymbol{S}_\rho$是自旋沿某一随时间转动方向的分量)

题 8.16 一束在 x 方向极化的热中子束，在 $t=0$ 时刻通过一个不变磁场 $\boldsymbol{B}$，磁场 $\boldsymbol{B}$ 沿子轴方向. (1) 证明中子的自旋态 $\psi(t)$ 是算符 S_ρ 的本征态(S_ρ是自旋角动量沿 $(\cos\rho, \sin\rho, 0)$ 方向的分量)，这里 $\rho=2\mu_n Bt/\hbar$ (μ_n是中子的磁矩). (2) 证明这一结果与一进动陀螺的经典结果一致. (3) 当 $B=10.00$mT，自旋转动 2π 的时间是 3.429μs. 计算 μ_n 的值(用核磁子表示).

解 (1) 中子类似电子，自旋角动量为$\dfrac{1}{2}$. 设其自旋算符为 S_2，S_2有两个本征态α和β相应的本征值为$+\dfrac{\hbar}{2}$和$-\dfrac{\hbar}{2}$. 中子的磁矩 μ_n (我们取正量)是指分量值. 它的方向与其自旋角动量方向相反，可以设想是负电荷分布的转动.

在 $t=0$ 时，中子处于 S_x 的本征值为 $+\frac{1}{2}\hbar$ 的本征态，(S_x 是自旋角动量沿 x 轴的分量)即

$$\psi(0)=\frac{\alpha+\beta}{\sqrt{2}}$$

在磁场作用的区域，Hamilton 量 H 有正比于 S_z 的项，所以 H 的本征态是 α 和 β，相应的能量是

$$E_\alpha=\mu_{\rm n}B,\qquad E_\beta=-\mu_{\rm n}B$$

这样用时间演化算符作用到 $\psi(0)$ 上可得

$$\psi(t)=\frac{\alpha\exp(-{\rm i}\omega t)+\beta\exp(i\omega t)}{\sqrt{2}}\tag{1}$$

这里

$$\omega=\frac{\mu_{\rm n}B}{\hbar}$$

现在我们考虑方向 $(\cos\rho,\sin\rho,0)$，即在 xy 平面内与 x 轴成 ρ 角度的方向. 相应这个方向的 Pauli 算符是

$$\sigma_\rho=\cos\rho\sigma_x+\sin\rho\sigma_y\tag{2}$$

由 Pauli 矩阵知识可知

$$\sigma_x\alpha=\beta,\qquad \sigma_y\alpha={\rm i}\beta\tag{3}$$

由式(2)、式(3)可知

$$\sigma_\rho\alpha=\cos\rho\sigma_x\alpha+\sin\rho\sigma_y\alpha$$

$$=(\cos\rho+{\rm i}\sin\rho)\beta={\rm e}^{{\rm i}\rho}\beta$$

类似有

$$\sigma_\rho\beta={\rm e}^{-{\rm i}\rho}\alpha$$

这样

$$\sigma_\rho\frac{1}{\sqrt{2}}\left({\rm e}^{-{\rm i}\rho/2}\alpha+{\rm e}^{{\rm i}\rho/2}\beta\right)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left({\rm e}^{{\rm i}\rho/2}\beta+{\rm e}^{-{\rm i}\rho/2}\alpha\right)$$

即函数

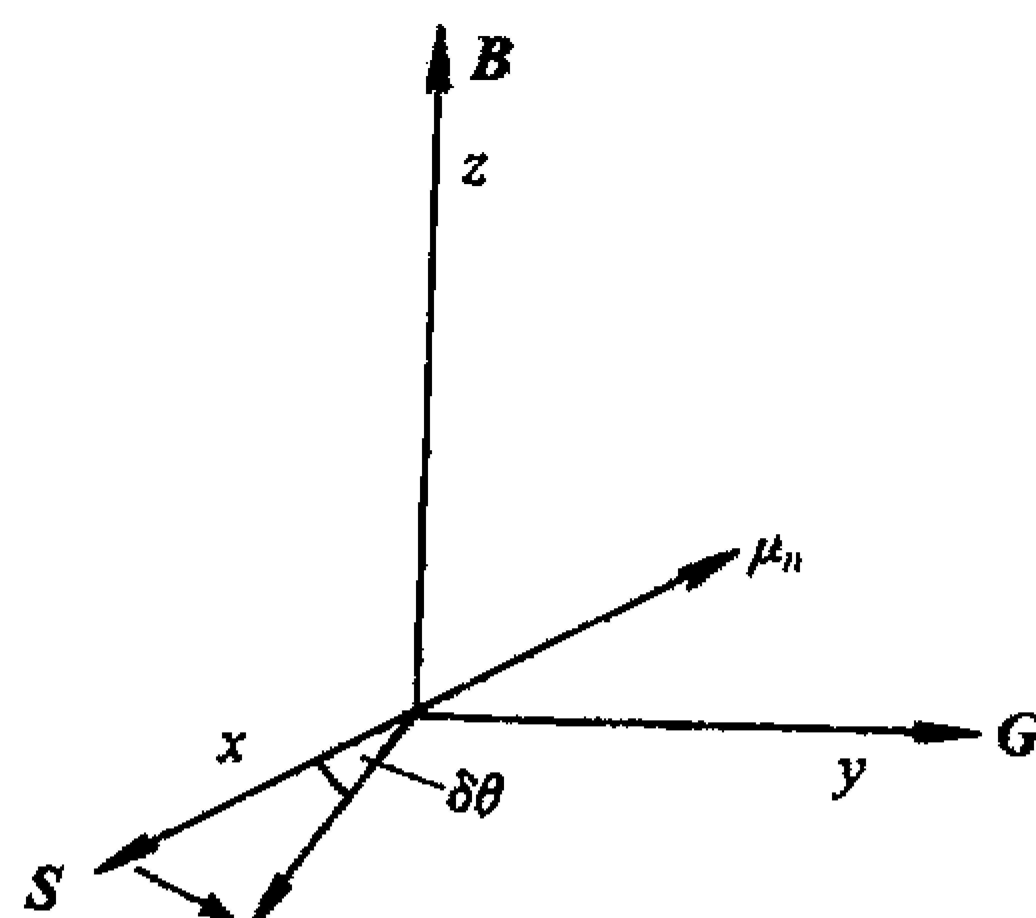
$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left({\rm e}^{-{\rm i}\rho/2}\alpha+{\rm e}^{{\rm i}\rho/2}\beta\right)\tag{4}$$

是 σ_ρ 的本征值为 1 的本征态. 对比式(1)与式(4)可知 $\psi(t)$ 正是 σ_ρ 本征值为 1 的本征态，而且有

$$\rho=2\omega t=\frac{2\mu_{\rm n}Bt}{\hbar}$$

量子力学的结果是在 xy 平面中自旋以 $\omega_{\rm L}$ 的角速度进动，进动角速度 $\omega_{\rm L}$ 为

$$\omega_{\rm L}=2\omega=\frac{2\mu_{\rm n}B}{\hbar}\tag{5}$$



题图 8.16

(2) 题图 8.16 给出了上述运动的经典描述，当角动量

矢量沿 $+x$ 方向，而磁矩沿 $-x$ 方向，磁场 $\boldsymbol{B}$ 沿 z 方向. 这时作用在磁矩上的力矩为

$$\boldsymbol{G}=\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{n}}\times\boldsymbol{B}=\mu_{\mathrm{n}}B\boldsymbol{e}_y$$

$\boldsymbol{e}_y$ 为 y 轴的单位方向矢量. 此力矩将引起 $\boldsymbol{S}$ 绕 $\boldsymbol{B}$ 方向进动. 经过 δt 时间，力矩将产生 $\boldsymbol{G}\delta t$ 的角动量. 因为中子已具有 x 方向的自旋角动量 $\frac{1}{2}\hbar$，要获得所要求的角动量，可以让 $\boldsymbol{S}$ 在 xy 平面里转动一个小角度 $\delta\theta$，这时有

$$\frac{1}{2}\hbar\sin\delta\theta\approx\frac{1}{2}\hbar\delta\theta=\mu_B B\delta t$$

这时转动的角速度为

$$\omega_{\mathrm{L}}=\frac{\delta\theta}{\delta t}=\frac{2\mu_{\mathrm{n}}B}{\hbar}$$

这与式(5)的结果一致.

ω_{L} 称为 Lamor 频率. 通常一个均匀磁场 $\boldsymbol{B}$ 总是引起粒子磁矩绕 $\boldsymbol{B}$ 的方向进动，其角频率为

$$\omega_{\mathrm{L}}=\gamma B$$

这里 γ 称为回磁比，即磁矩分量与角动量分量之比.

(c) 设 t_0 是自旋转动 2π 角所需时间，则有

$$\omega_{\mathrm{L}}=\frac{2\pi}{t_0}=\frac{2\mu_{\mathrm{n}}B}{\hbar}$$

即

$$\mu_{\mathrm{n}}=\frac{\pi\hbar}{Bt_0}=9.662\times10^{-27}\,\mathrm{J\cdot T^{-1}}=1.913\mu_{\mathrm{n}}$$

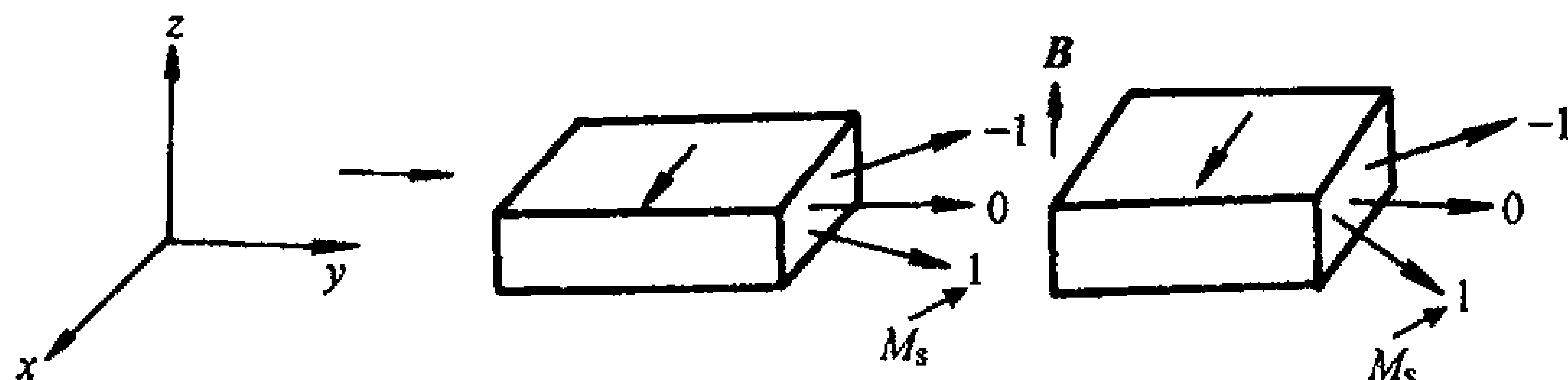
讨论 对 S_x, S_y 求平均值可得

$$\langle S_x\rangle=\frac{\hbar}{2}\cos\frac{2\mu_{\mathrm{n}}Bt}{\hbar},\qquad \langle S_y\rangle=\frac{\hbar}{2}\sin\frac{2\mu_{\mathrm{n}}Bt}{\hbar}$$

与经典图像类似.

8.17 氢分子通过两个不同取向的 Stern-Gerlach 仪器后各分束分子数的比例

题 8.17 (1) 三态氢分子(质子自旋态 $S=1$)束沿 y 轴运动，通过一个磁场沿 x 轴方向的 Stern-Gerlach 实验装置(题图 8.17)分子束从装置射出后，$M_s=1$ 的分子又通过第二个 Stern-Gerlach 实验仪，它的磁场同样沿 x 轴. 一个常磁场 $\boldsymbol{B}$ 沿 z 轴方向位于两个实验仪器的通路上. 证明从第二个实验仪器出来的 $M_s=1,0,-1$ 的分子数的比例是



题图 8.17

$$\cos^4(\omega t/2), \qquad 2\sin^2(\omega t/2)\cos^2(\omega t/2), \qquad \sin^4(\omega t/2)$$

这里 $\omega = 2\mu_p B/\hbar$，t 是分子在磁场 $\boldsymbol{B}$ 中的飞行时间(μ_p 是质子的磁矩.)(2) 当处于 $\boldsymbol{B}$ 中的路程长为 20mm，分子能量为 25meV，这时将发现，若磁场 $B = 1.80\left(n+\frac{1}{2}\right)$mT 时第二个实验仪中没有 $M_s = 1$ 的分子出来，这里 n 为整数. 由此导出 μ_p 的大小用核磁子表示(ortho 氢分子中的电子的自旋是反平行的).

解　(1) ortho 氢分子中两个质子的自旋态量子数 $S=1$，所以有 $M_s = 1, 0, -1$. 由于分子中两个电子的自旋是反平行的，所以 Stern-Gerlach 实验仪和两个实验仪之间通道上的磁场都只对质子的磁矩有作用. 从第一个 Stern-Gerlach 实验仪器出来的 S_x 的本征值为 $M_s = 1$ 的本征态可视为是刚进入磁场 $\boldsymbol{B}$ 的初态 $\psi(0)$, $t=0$ 设定为分子刚进入磁场 $\boldsymbol{B}$ 的时刻. 我们必须先将 $\psi(0)$ 写成 Hamilton 量的本征态的线性组合，由角动量理论容易得到

$$\psi(0) = \frac{\phi_1 + \sqrt{2}\phi_0 + \phi_{-1}}{2}$$

式中，ϕ_1, ϕ_0, ϕ_{-1} 分别是 S_z 的本征值 $M_s = 1, 0, -1$ 的本征态. ortho 氢分子的磁矩 $\mu = 2\mu_p$ (μ_p 为核磁子)，所以 ϕ_1, ϕ_0, ϕ_{-1} 在磁场中的能量分别为

$$E_1 = -\mu B, \qquad E_0 = 0, \qquad E_{-1} = \mu B$$

因此，有

$$\psi(t) = \frac{1}{2}\left[\phi_1 \exp(\mathrm{i}\omega t) + \sqrt{2}\phi_0 + \phi_{-1}\exp(-\mathrm{i}\omega t)\right] \tag{1}$$

式中

$$\omega = \frac{\mu B}{\hbar} \tag{2}$$

下面我们再用 S_x 的本征态的线性组合写出 $\psi(t)$，这里 t 时刻表示分子离开磁场 $\boldsymbol{B}$ 的时刻，用表象变换理论同样可得

$$\begin{aligned}\psi(t) &= C_1\phi_1' + C_0\phi_0' + C_{-1}\phi_{-1}' \\ &= C_1\frac{\phi_1 + \sqrt{2}\phi_0 + \phi_{-1}}{2} + C_0\frac{\phi_1 - \phi_{-1}}{\sqrt{2}} + C_{-1}\frac{\phi_1 - \sqrt{2}\phi_0 + \phi_{-1}}{2}\end{aligned} \tag{3}$$

式中，ϕ_1', ϕ_0', ϕ_{-1}' 分别是 S_x 的本征态.

对比式(1)、式(3)两式，可知

$$\begin{aligned} &C_1 + C_{-1} + \sqrt{2}C_0 = \exp(\mathrm{i}\omega t) \\ &C_1 + C_{-1} - \sqrt{2}C_0 = \exp(-\mathrm{i}\omega t) \\ &C_1 - C_{-1} = 1 \end{aligned} \tag{4}$$

由式(4)易得

$$C_1 = \cos^2\frac{\omega t}{2}, \quad C_{-1} = \sin^2\frac{\omega t}{2}, \quad C_0 = \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\sin\omega t \tag{5}$$

这样从第二个 Stern-Gerlach 实验仪出来的 $M_s = 1$，0，-1 的分子概率之比为

$$|C_1|^2 : |C_0|^2 : |C_{-1}|^2$$

即

$$\cos^4\frac{\omega t}{2}:2\sin^2\frac{\omega t}{2}\cos^2\frac{\omega t}{2}:\sin^4\frac{\omega t}{2}$$

(2) 当 $\omega t=(2n+1)\pi$ 时，由式(5)可知从第二个实验仪器出来的分子中没有 $M_s=1$ 的分子(其中 n 为整数). 由式(2)可知，这相当于

$$\frac{\mu B}{\hbar}t=\frac{2\mu_p B}{\hbar}t=(2n+1)\pi$$

即

$$\mu_p=\frac{\pi\hbar}{B_0 t} \tag{6}$$

这里

$$B_0=1.80\text{mT}$$

若 E 是分子的动能，d 是分子在 $\boldsymbol{B}$ 中经过的距离，则

$$E=\frac{1}{2}mv^2=\frac{m_p d^2}{t^2} \tag{7}$$

式中，m 为氢分子的质量它等于 2 倍的质子质量 m_p. 从式(7)得到 t 代入式(6)，有

$$\mu_p=\frac{\pi\hbar}{B_0 d}\left(\frac{E}{m_p}\right)^{1/2}=1.424\times10^{-26}\text{J}\cdot\text{T}^{-1}=2.82\mu_n$$

讨论 (1) 本题是这样一个事实的直接显例，$\psi(t)$ 是 S_ρ 的本征值 $M_s=1$ 的本征态，这里的 S_ρ 是自旋沿 $(\cos\rho,-\sin\rho,0)$ 的分量算符，

$$\rho=\frac{\mu}{\hbar}Bt$$

换言之，正如上题结果，量子力学的计算结果同将两个质子看成陀螺在磁场力作用下，绕着场方向以 Lamor 频率 $\omega_L=\gamma B$ 作进动的经典图像一致. 不过这里的回磁比 $\gamma=\mu/\hbar$. 这里的进动方向与中子相反，原因是质子自旋角动量与磁矩方向相同.

(2) 当自旋进动过 π 角后，分子将处于 $M_s=-1$ 态(相对于 x 轴). 这一点我们也许能通过物理直觉猜测到，然而如果猜测进动 $\dfrac{\pi}{2}$ 是 $M_s=0$ 的态那就错了，量子力学计算证明这时态是以 50%的概率处于 $M_s=0$ 以 25%的概率处于 $M_s=\pm1$ 中的一个. 而对于进动 $\dfrac{\pi}{2}$ 后，期望值 $\langle S_x\rangle=0$.

8.18 位移平均值的变化与经典振子相似的谐振子波包

题 8.18 一个质量为 m，角频率为 ω 的一维谐振子，在 $t=0$ 时初态为

$$\psi(0)=\frac{1}{\sqrt{2S}}\sum|n\rangle$$

这里 $|n\rangle$ 是 Hamilton 量的量子数为 n 的本征态，求和从 $n=N-S$ 到 $N+S$，并且有 $N\gg S\gg1$. (1) 证明位移的平均值按正弦规律变化，振幅为 $(2\hbar N/m\omega)^{1/2}$. (2) 将上述结果与一个经典

谐振子的位移随时间的变化相比较.

解　(1) 因为 $\psi(0)=\frac{1}{\sqrt{2S}}\sum_n |n\rangle$，所以

$$\psi(t)=\frac{1}{\sqrt{2S}}\sum_n |n\rangle \exp(-\mathrm{i}E_n t/\hbar)$$
$$=\frac{1}{\sqrt{2S}}\sum_n |n\rangle \exp\left[-\mathrm{i}\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega t\right]$$

式中，$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$ 为谐振子能量. 位移 x 可写为

$$x=g(a+a^\dagger)$$

式中，a、$a^\dagger$ 为谐振子湮灭、产生算符，$g=\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2}$.

位移的期望值可写为

$$\langle x\rangle = g\left\langle \psi(t)\middle| a+a^\dagger \middle|\psi(t)\right\rangle$$
$$=\frac{g}{2S}\sum_{n'n}\left\langle n'\middle| a+a^\dagger\middle| n\right\rangle \exp(i(n'-n)\omega t)$$

由关系式

$$a|n\rangle=\sqrt{n}|n-1\rangle,\qquad a^\dagger|n\rangle=\sqrt{n+1}|n+1\rangle$$

可证，除非 $n'=n\pm1$，其余矩阵元为零，所以有

$$\langle x\rangle=\frac{g}{2S}\sum_n \sqrt{n}\exp(-\mathrm{i}\omega t)+\sqrt{n+1}\exp(\mathrm{i}\omega t) \tag{1}$$

因为求和号中 n 由 $N-S$ 到 $N+S$，且 $N\gg S\gg 1$，所以有

$$\sqrt{n}\approx\sqrt{n+1}\approx\sqrt{N}$$

求和号中共有 $2S+1\approx 2S$ 项，每项大小基本相等，因此，有

$$\sum_n \sqrt{n}\exp(-\mathrm{i}\omega t)+\sqrt{n+1}\exp(\mathrm{i}\omega t)\approx 4S\sqrt{N}\cos\omega t$$

代入式(1)，得

$$\langle x\rangle=\left(\frac{2\hbar N}{m\omega}\right)^{1/2}\cos\omega t \tag{2}$$

(2) 经典谐振子运动方程为

$$m\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2}+kx=0 \tag{3}$$

令 $k=m\omega^2$，方程的解为 $x=A\cos\omega t$，振子总能量为

$$E=\frac{1}{2}kx^2+\frac{1}{2}m\dot{x}^2=\frac{1}{2}m\omega^2A^2 \tag{4}$$

在量子计算中

$$E\approx\left(N+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\approx N\hbar\omega$$

所以量子力学振幅为

$$\left(\frac{2\hbar N}{m\omega}\right)^{1/2}\approx\left(\frac{2E}{m\omega^2}\right)^{1/2}$$

由式(4)可见，量子振幅与经典振幅相同，所以式(2)中 $\langle x\rangle$ 的表达式与式(3)中的经典结果相同. 这样我们就证明了一个大数量的能量本征态的相干组合，组合的能量分布比它们的平均能量小的多 $(1\ll S\ll N)$，则这一组合的解为类似一个经典振子.

8.19 处于基态的氢原子系统在脉冲电压的电容器中经过长时间后处于 2p 态的比例

题 8.19 一个处于基态的氢原子系统被放置在平行板电容器的两极板之间. 一个脉冲电压被加在电容器两极板上，在电容器内产生一个均匀电场

$$\varepsilon=0,\quad t<0;\qquad \varepsilon=\varepsilon_0 e^{-t/\tau},\quad t>0$$

(1) 证明，很长时间后处于 $2p(m=0)$ 态的原子的比例(一阶近似下)是

$$\frac{2^{15}}{3^{10}}\cdot\frac{a_0^2e^2\varepsilon_0^2}{\hbar^2(\omega^2+1/\tau^2)}$$

这里 a_0 是 Bohr 半径，$\hbar\omega$ 是 2p 态与基态之间的能量差. (2) 处于 2s 态的原子的比例是多少?

解 (1) 由一阶含时微扰论可知，若含时微扰 Hamilton 量 $H^{(1)}$ 在 $t=0$ 时，作用在系统上. 系统初态为 $|k\rangle$ 相应的本征能量为 E_k，则在 t 时刻跃迁到能量为 E_j 的 $|j\rangle$ 态的概率为 $|C_j|^2$，这里

$$C_j=\frac{1}{i\hbar}\int_0^t\left\langle j\middle|H^{(1)}(t')\middle|K\right\rangle\exp(i\omega t')dt',\qquad \hbar\omega=E_j-E_k \tag{1}$$

由题意可知，本题中有

$$H^{(1)}(t')=e\varepsilon_0 z\exp(-t'/\tau),\qquad t'>0$$

其中电场的方向沿 z 轴.

当 $t\to\infty$ 时，式(1)变为

$$C_j=\frac{e\varepsilon_0}{i\hbar}\langle j|z|k\rangle\int_0^\infty\exp\left[\left(i\omega-\frac{1}{\tau}\right)t'\right]dt'$$

由于其中时间积分为

$$\int_0^\infty\exp\left[\left(i\omega-\frac{1}{\tau}\right)t'\right]dt'=\frac{1}{i\omega-\frac{1}{\tau}}\left[\exp\left[\left(i\omega-\frac{1}{\tau}\right)t'\right]\right]_0^\infty=-\frac{1}{i\omega-\frac{1}{\tau}}$$

所以

$$C_j=\frac{e\varepsilon_0}{\hbar(\omega+i/\tau)}\langle j|z|k\rangle \tag{2}$$

设 $|k\rangle$ 为基态 u_{100}，$|j\rangle$ 为 2p 态 u_{210}，则有

$$\langle j|z|k\rangle = \int_{\text{全空间}} u_{210}^* r\cos\theta u_{100}\,\mathrm{d}V$$

将

$$\begin{cases} u_{100} = R_{10}Y_{00} = \dfrac{2}{\sqrt{4\pi}}\cdot\dfrac{1}{a_0^{3/2}}\exp\left(-\dfrac{r}{a_0}\right) \\ u_{210} = R_{21}Y_{10} = \dfrac{1}{\sqrt{4\pi}}\cdot\dfrac{1}{(2a_0)^{3/2}}\dfrac{r}{a_0}\exp\left(-\dfrac{r}{2a_0}\right)\cos\theta \end{cases}$$

代入式(2)，则可得

$$\begin{aligned}\langle j|z|k\rangle &= \frac{1}{2^{3/2}}\cdot\frac{1}{a_0^4}\int_0^\infty r^4\exp\left(-\frac{3r}{2a_0}\right)\mathrm{d}r\int_0^\pi\cos^2\theta\sin\theta\mathrm{d}\theta \\ &= \frac{4!}{2^{3/2}}\left(\frac{2}{3}\right)^6 a_0 \end{aligned} \tag{3}$$

$\left(\text{上面用到公式}\int_0^\infty r^4\exp(-\beta r)\mathrm{d}r = \dfrac{4!}{\beta^5}\right)$. 将式(3)代入式(2)后，最后可计算出跃迁概率为

$$P = |C_j|^2 = \frac{2^{15}}{3^{10}}\cdot\frac{a_0^2e^2\varepsilon_0^2}{\hbar^2(\omega^2+1/\tau^2)}$$

(2) 从基态跃迁到 $2s$ 态的概率为零. 原因是 u_{100} 是偶宇称态，u_{200} 也是偶宇称态，而 z 是奇宇称算符，因此 $u_{200}^*\,z\,u_{100}$ 为奇宇称，在全空间积分后为零. 由于相应的跃迁矩阵元 $\langle j|z|k\rangle$ 为零故跃迁概率为零.

8.20　证明跃迁速率为 γ 的原子体系的辐射能谱是 Lorentz 型的

题 8.20　一个原子体系能够产生从激发态到基态的辐射跃迁. 若跃迁速率为 γ，证明辐射的能量谱是 Lorentz 型的且角频率的半高宽等于 γ.

解　假定 $t=0$ 时，有 N_0 个原子处于能级为 E_k 的激发态 $|k\rangle$，在后来的时间 t 有 N 个原子处于 $|k\rangle$ 态，根据 γ 的定义有

$$\mathrm{d}N = -\gamma N\mathrm{d}t$$

上面方程的解为

$$N = N_0\exp(-\gamma t)$$

即发现原子处于激发态的概率为

$$P = \exp(-\gamma t)$$

设激发态 $|k\rangle$ 的波函数可写为

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = u_k(\boldsymbol{r})\exp(-\mathrm{i}\omega_k t)$$

这里 $\omega_k = E_k/\hbar$. 当考虑到衰减时原子的波函数可写为

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = C_k(t)u_k(\boldsymbol{r})\exp(-\mathrm{i}\omega_k t) \tag{1}$$

式中，$|C_k(t)|^2$ 是发现原子处于 K 态的概率也就是说

$$C_k(t)=\exp(-\gamma t/2)\,,\qquad t>0$$

将式(1)写成

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=u_k(\boldsymbol{r})f(t)$$

式中

$$f(t)=\exp\left[\left(-\frac{1}{2}\gamma-\mathrm{i}\omega_k\right)t\right]$$

将上式写成傅里叶变换的形式，即

$$f(t)=\int_{-\infty}^{\infty}g(\omega)\exp(-\mathrm{i}\omega t)\mathrm{d}\omega$$

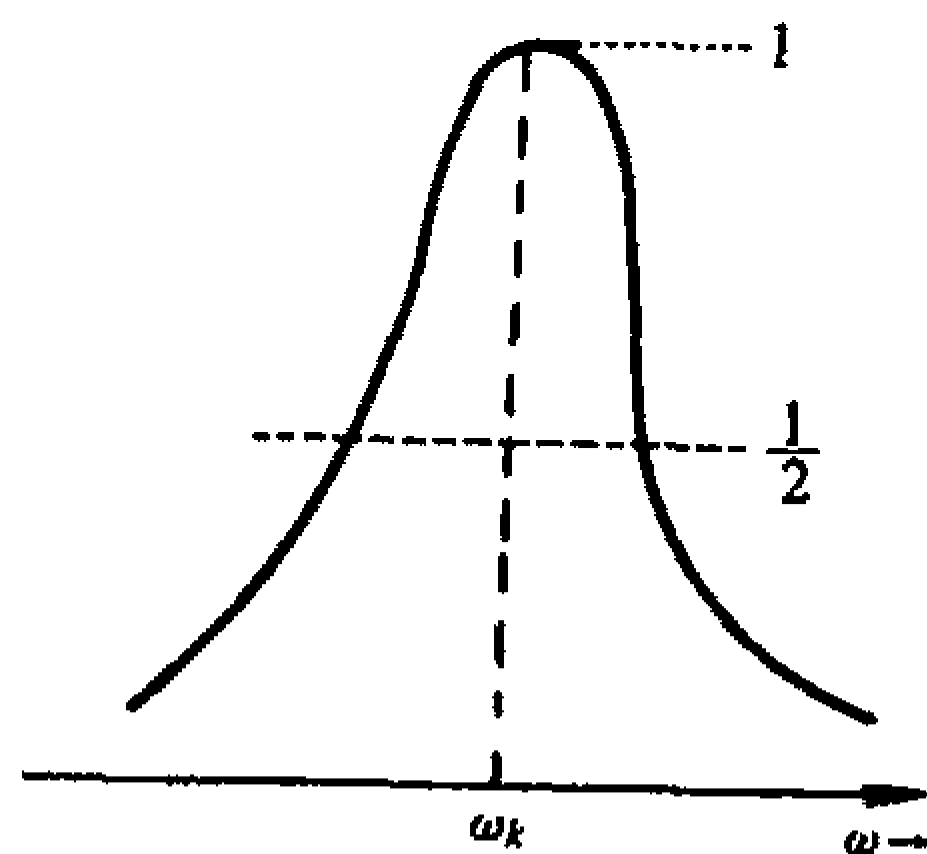
则 $|g(\omega)|^2$ 表示 $f(t)$ 中存在的不同角频率振动的强度. 因为

$$g(\omega)\propto\int_{-\infty}^{\infty}f(t)\exp(\mathrm{i}\omega t)\mathrm{d}t$$

$$\propto\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[\left(-\frac{1}{2}\gamma-\mathrm{i}\omega_k+\mathrm{i}\omega\right)t\right]\mathrm{d}t$$

$$=\frac{1}{\frac{1}{2}\gamma-\mathrm{i}(\omega-\omega_k)}$$

所以



题图 8.20

$$|g(\omega)|^2\propto\frac{1}{(\omega-\omega_k)^2+\frac{1}{4}\gamma^2}$$

这种函数形式称为 Lorentz 型，定性地说它类似于 Gauss 函数，但比 Gauss 函数下降的慢些，当 $\omega=\omega_k$ 时函数有极大值，当 $|\omega-\omega_k|\gg\gamma$ 时趋于零(题图 8.20).

当 $\omega-\omega_k=\pm\frac{1}{2}\gamma$ 时 $|g(\omega)|^2$ 下降到极大值的一半，故此 Lorentz 型的频率分布的半高宽为 γ.

8.21 已知 κ 介子态 $|K_1\rangle$ 和 $|K_s\rangle$ 寿命，求 $|K^0\rangle$ 和 $|\bar{K}^0\rangle$ 出现概率

题 8.21 中性 κ 介子态 $|K^0\rangle$ 和 $|\bar{K}^0\rangle$ 可以用态 $|K_1\rangle$, $|K_s\rangle$ 来表示

$$|K^0\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|K_1\rangle+|K_s\rangle)$$

$$|\bar{K}^0\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|K_1\rangle-|K_s\rangle)$$

态 $|K_1\rangle$ 和 $|K_s\rangle$ 有确定的寿命 $\tau_1=1/\gamma_1$ 和 $\tau_s=1/\gamma_s$，且有不同的静止能 $m_1c^2\neq m_sc^2$. $t=0$ 时刻

产生一个介子，$|\psi(t=0)\rangle=|K^0\rangle$，用 $P_0(t)$ 表示 t 时刻发现系统处于 $|K^0\rangle$ 态的概率，$\bar{P}_0(t)$ 则表示处于 $|\bar{K}^0\rangle$ 态的概率，求 $P_0(t)-\bar{P}_0(t)$ 的表达式，以 γ_1，γ_s，m_1c^2 和 m_sc^2 来表示(不考虑 CP 不守恒).

解　对亚稳定，$E=E_0-\dfrac{\mathrm{i}}{2}\cdot\dfrac{\hbar}{\tau}$

$$
\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle&=\frac{1}{\sqrt{2}}\left\{|K_1\rangle\exp\left[-\mathrm{i}\left(m_1c^2/\hbar-\frac{\mathrm{i}}{2}\gamma_1\right)t\right]\right.\\
&\quad\left.+|K_s\rangle\exp\left[-\mathrm{i}\left(m_sc^2/\hbar-\frac{\mathrm{i}}{2}\gamma_s\right)t\right]\right\}\\
&=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[|K_1\rangle\exp\left(-\mathrm{i}m_1c^2t/\hbar\right)\exp\left(-\frac{1}{2}\gamma_1t\right)\right.\\
&\quad\left.+|K_s\rangle\exp\left(-\mathrm{i}m_sc^2t/h\right)\exp\left(-\frac{\gamma_st}{2}\right)\right]
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
P_0(t)&=\left|\langle K^0|\psi(t)\rangle\right|^2\\
&=\frac{1}{4}\left|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m_1\mathrm{e}^2t/\hbar}\mathrm{e}^{-\gamma_1t/2}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m_1\mathrm{e}^2t/\hbar}\mathrm{e}^{-\gamma_st/2}\right|^2\\
&=\frac{1}{4}\left[\mathrm{e}^{-\gamma_1t}+\mathrm{e}^{-\gamma_st}+2\mathrm{e}^{-(\gamma_1+\gamma_s)t/2}\cos\frac{(m_1-m_s)c^2t}{\hbar}\right]
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\bar{P}_0(t)&=\left|\langle\bar{K}^0|\psi(t)\rangle\right|^2\\
&=\frac{1}{4}[\mathrm{e}^{-\gamma_1t}+\mathrm{e}^{-\gamma t}-2\mathrm{e}^{-(\gamma_1+\gamma_s)t/2}\cos\frac{(m_1-m_s)c^2t}{\hbar}
\end{aligned}
$$

所以

$$
P_0(t)-\bar{P}_0(t)=\mathrm{e}^{-(\gamma_1+\gamma_s)/2}\cos\frac{(m_1-m_s)c^2t}{\hbar}
$$

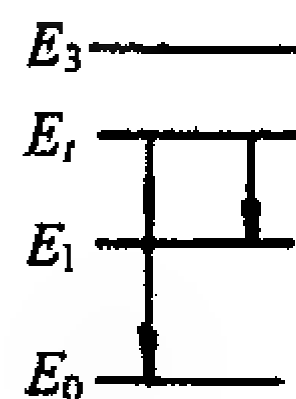
8.22　已知跃迁率求跃迁发射的能量比与能级辐射寿命

题 8.22　一原子四个最低能级态为(题图 8.22)

$$
E_0=-14.0\mathrm{eV},\ E_1=-9.0\mathrm{eV},\ E_2=-7.0\mathrm{eV},\ E_3=-5.5\mathrm{eV}
$$

对 $i\to j$ 跃迁的跃迁率 A_{ij} (Einstein 系数)为

$$
\begin{aligned}
&A_{10}=3.0\times10^8\mathrm{s}^{-1},\quad A_{20}=1.2\times10^8\mathrm{s}^{-1}\\
&A_{30}=4.5\times10^7\mathrm{s}^{-1},\quad A_{21}=8.0\times10^7\mathrm{s}^{-1}\\
&A_{31}=0,\quad A_{32}=1.0\times10^7\mathrm{s}^{-1}
\end{aligned}
$$



题图 8.22

设想有个包含大量处于 E_2 能级的原子容器. (1) 求单位时间 $E_2\to E_0$ 跃迁与 $E_2\to E_1$ 跃迁

所发射的能量比. (2) 计算 E_2 能级的辐射寿命.

解　(1) 单位时间发射的能量为

$$(E_i - E_j)A_{ij}$$

因此所求比率为

$$\frac{E_2 - E_0}{E_2 - E_1}\frac{A_{20}}{A_{21}} = \frac{7}{2}\times\frac{12}{8} = 5.25$$

(2) 自发辐射下 E_2 能级可跃迁到 E_0 和 E_1 能级，因此在 $\mathrm{d}t$ 时间内 E_2 能级减少的原子数为

$$\mathrm{d}N_2 = -(A_{20} + A_{21})N_2\mathrm{d}t$$

积分得

$$N_2 = N_{20}\exp\left[-(A_{20} + A_{21})t\right]$$

式中，N_{20} 是 $t=0$ 时处于 E_2 能级上的原子数目. 平均寿 τ 为

$$\tau = \frac{1}{N_{20}}\int_{t=0}^{\infty} t(-\mathrm{d}N_2)$$

$$\approx \frac{1}{A_{20} + A_{10}} = 5.0\times10^{-9}\mathrm{s}$$

8.23　处于 2p 的氢原子自发射辐等于受激跃迁概率的温度

题 8.23　一个处于第一激发态(2p)的氢原子位于一空腔中，当空腔的温度等于多少时，自发跃迁概率和受激跃迁概率相等?

解　空腔中氢原子的受激跃迁概率为

$$\omega_{12} = \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2}|\boldsymbol{r}_{12}|^2 \rho(\omega_{21})$$

自发跃迁概率为

$$A_{12} = \frac{4e^2\omega_{21}^3}{3\hbar c^3}|\boldsymbol{r}_{12}|^2$$

要求两者相等. 得

$$\frac{\pi^2}{\hbar}\rho(\omega_{21}) = \frac{\omega_{21}^3}{c^3}$$

用黑体辐射公式

$$\rho(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3}\cdot\frac{1}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1}$$

可得

$$\exp\left(\hbar\omega_{21}/kT\right) = 2$$

$$T = \frac{\hbar\omega_{21}}{k\ln 2} = 1.76\times10^5\mathrm{K}$$

8.24　基态氢原子在弱电场 $E=E_0 e^{-\Gamma t}\theta(t)$ 作用下，处于 $n=2$ 态的概率

题 8.24　处于基态的一个氢原子(由无自旋电子和质子组成)被放置在一平板电容器之间，并受一均匀弱电场

$$E=E_0 e^{-\Gamma t}\theta(t)$$

作用，其中 $\theta(t)$ 为阶梯函数 $\theta(t)=0,\ t<0$；且 $\theta(t)=1$，$t>0$. 求经过长时间后，原子处于 $n=2$ 中任意态的概率，准确到第一阶. 球坐标中氢原子的一些波函数为

$$\psi_{100}=\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-r/a_0}$$

$$\psi_{210}=\frac{1}{\sqrt{32\pi a_0^3}}e^{-\gamma/2a_0}\frac{r}{a_0}\cos\theta$$

$$\psi_{200}=\frac{1}{\sqrt{8\pi a_0^3}}\left(1-\frac{r}{2a_0}\right)e^{-r/2a}$$

$$\psi_{21\pm1}=\mp\frac{1}{\sqrt{64\pi a_0^3}}\cdot\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0}\sin\theta e^{\pm i\phi}$$

一个有用的积分是

$$\int_0^\infty dx x^n e^{-a^x}=\frac{n!}{a^{n+1}}$$

解　设电场沿 z 轴，则

$$H'=e\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{E}(t)=ezE(t)$$

由选择定则

$$\langle 2s|H'|1s\rangle=eE(t)\langle 2s|z|1s\rangle=0$$

因此由 1s → 2s 跃迁概率为

$$P(1s\to 2s)=0$$

2p 态三度简并 $|2p,m\rangle$，$(m=1,\ 0,\ -1)$，由矩阵元的选择定则知

$$\langle 2p,1|H'|1s,0\rangle=\langle 2p,-1|H'|1s,0\rangle=0$$

因此 1s → 2p 的跃迁概率归结为求 $|1s,0\rangle\to|2p,0\rangle$ 的跃迁概率.

$$\begin{aligned}
&\langle 2p,0|H'|1s,0\rangle\\
&=\frac{eE(t)}{4\sqrt{2}\pi a_0^4}\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi}\exp\left(-\frac{3}{2}r/a_0\right)r^4\cos^2\theta\sin\theta drd\theta d\varphi\\
&=\frac{eE(t)}{4\sqrt{2}\pi a_0^4}2\pi\cdot\frac{2}{3}\cdot\frac{4!}{\left(\frac{3}{2a_0}\right)^5}=\frac{2^7\sqrt{2}a_0 e}{3^5}E(t)
\end{aligned}$$

$$c_{2p0,1s0} \equiv \frac{1}{i\hbar}\int_0^\infty \langle 2p0|H'|1s0\rangle e^{i\omega_{21}t}dt$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\frac{2^7\sqrt{2}a_0 e}{3^5}E_0\int_0^\infty e^{-t/\tau}e^{i\omega_{21}t}dt \qquad (\tau = 1/\Gamma)$$

$$= \frac{2^7\sqrt{2}a_0 e E_0}{3^5 i\hbar}\cdot\frac{1}{\frac{1}{\tau}-i\omega_{21}}$$

因此

$$P_{(1s\to 2p)} = \left|c_{2p0,1s0}\right|^2 = \frac{2^{15}a^2e^2E^2\tau^2}{3^{10}\hbar^2(1+\omega_{21}^2\tau^2)}$$

式中

$$\omega_{21} = \frac{1}{\hbar}(E_2 - E_1) = \frac{3e^2}{8a_0\hbar}$$

8.25 分子转动能级，电偶极辐射选择定则及频率对 J 的依赖

题 8.25 设有由质量为 M 的相同的两个原子组成的双原子分子，两原子相距为 D. 分子是电极化的且绕通过质心垂直于两原子联线的轴转动. (1) 用角动量量子数 J 和其他力学参量表出分子转动态的能量. (2) 导出分子转动态的电偶极辐射的选择定则. (3) 确定转动分子电偶极辐射的频率对 J 的依赖关系. (把答案表示为 J,M,D 和其他必须引入的普适常数的函数).

解 (1) $H = \frac{1}{2I}J^2$，J 是总角动量算符，转动惯量 $I = \frac{1}{2}MD^2$，M 是一个原子的质量. 故

$$E_J = \frac{1}{MD^2}J(J+1)\hbar^2$$

(2) 转动态本征函数即为球谐函数 Y_{Jm}，设电场沿正 z 轴，选择定则为

$$\langle J''m''|\cos\theta|J'm'\rangle \neq 0$$

由于

$$\langle J''m''|\cos\theta|J'm'\rangle$$

$$= \sqrt{\frac{(J'+1-m')(J'+1+m')}{(2J'+1)(2J'+3)}}\delta_{J'',J'+1}\delta_{m''m'} + \sqrt{\frac{(J'+m')(J'-m')}{(2J'+1)(2J'-1)}}\delta_{J'',J'-1}\delta_{m''m'}$$

所以选择定则为

$$\Delta J = J'' - J' = \pm 1$$

$$\Delta m = m'' - m' = 0$$

(3) J 到 $J-1$ 能级间的跃迁

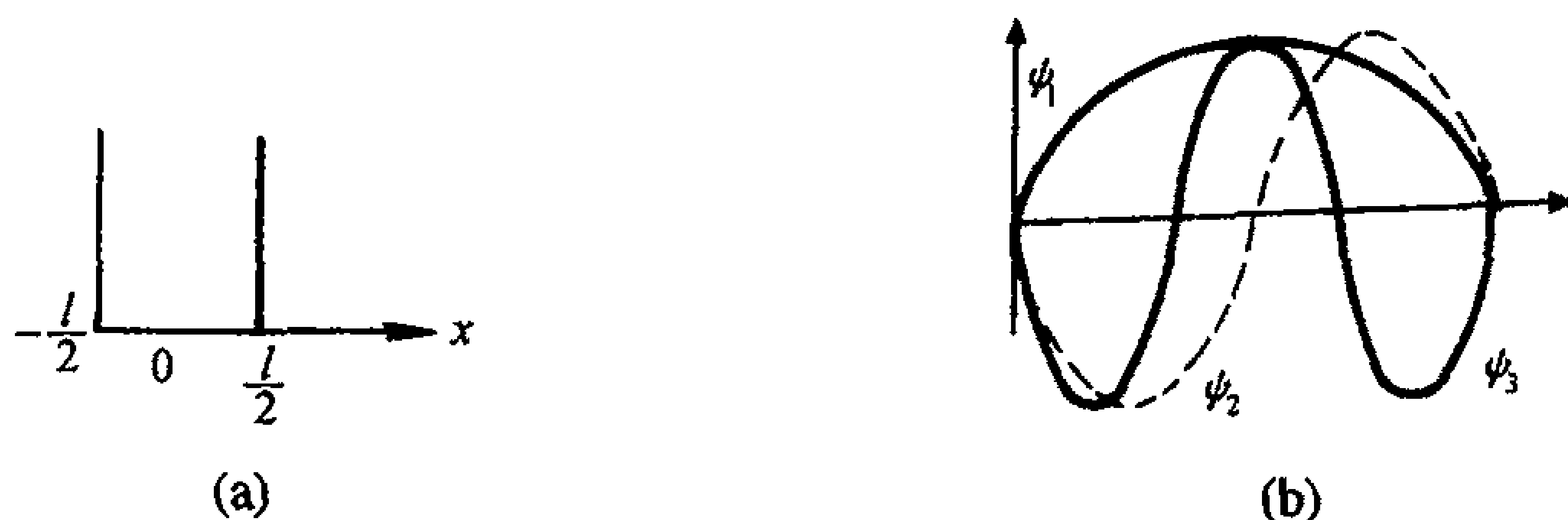
$$\hbar\omega = \Delta E = \frac{1}{MD^2}J(J+1)\hbar^2 - \frac{1}{MD^2}(J-1)J\hbar^2 = \frac{2J\hbar^2}{MD^2}$$

所以

$$\omega = \frac{2J\hbar}{MD^2}$$

8.26　一维深势阱中电偶极跃迁距阵元及选择定则

题 8.26　(1) 一个质量为 m 的粒子束缚在一个宽为 l 的一维深方阱势中(题图 8.26(a))求在势阱底部上粒子基态和头两个激发态的能量，画出相应波函数. (2) 计算从头两个激发态到基态间电偶极跃迁的距阵元，并解释任何定量差别(不必算出所有积分). (3) 给出系统任意两个态之间电偶极跃迁的一般选择定则.



题图 8.26

解　(1) 系统能级为

$$E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}n^2, \qquad n = 1, 2, \cdots$$

偶宇称波函数为

$$\psi_n^+(a) = \sqrt{\frac{2}{l}}\cos\frac{n\pi x}{l}, \qquad n = \text{奇数}$$

奇宇称波函数

$$\psi_n^-(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin\frac{n\pi x}{l}, \qquad n = \text{偶数}$$

基态与头两个激发态分别为

$$n=1, \quad E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ml^2}, \quad \psi_1^+(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\cos\left(\frac{\pi x}{l}\right)$$

$$n=2, \quad E_2 = 4E_1, \quad \psi_2^-(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin\left(\frac{2\pi x}{l}\right)$$

$$n=3, \quad E_3 = 9E_1, \quad \psi_3^+(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\cos\left(\frac{3\pi x}{l}\right)$$

相应波函数图如题图 8.26(b)所示.

(2) 电偶极跃迁下 Einstein 系数

$$A_{kk'}=\frac{4e^2\omega_{k'k}^3}{3\hbar c^3}|r_{kk'}|^2$$

第一激发态到基态的电偶极跃迁矩阵元为

$$\langle x\rangle_{21}=\int_{-l/2}^{l/2}\psi_1^*(x)x\psi_2(x)\mathrm{d}x$$

$$=\frac{2}{l}\int_{-l/2}^{l/2}x\cos\frac{\pi x}{l}\sin\frac{2\pi x}{l}\mathrm{d}x$$

第二激发态到基态电偶极跃迁矩阵元为

$$\langle x\rangle_{31}=\int_{-l/2}^{l/2}\psi_1^*(x)x\psi_3(x)\mathrm{d}x$$

$$=\frac{2}{l}\int_{-l/2}^{l/2}x\cos\frac{\pi x}{l}\cos\frac{3\pi x}{l}\mathrm{d}x$$

第二个矩阵元由于被积函数是奇的，故 $(x)_{31}=0$，即第二激发态在电偶极下不会跃迁到基态. 而第一激发态在电偶极下则可跃迁到基态.

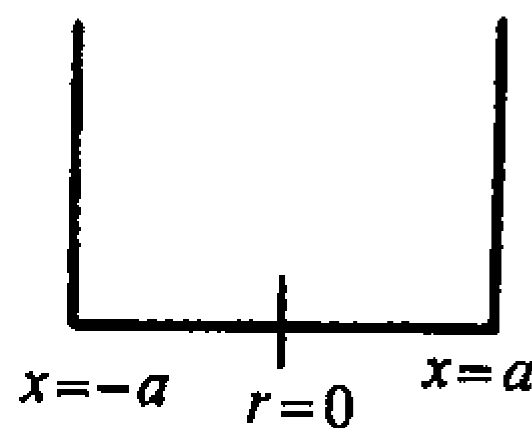
(3) 该系统在电偶极跃迁下的 $k\to k'$ 矩阵元为

$$\langle x\rangle_{kk'}=\int_{-l/2}^{l/2}\psi_{k'}^*(x)\psi_k(x)x\mathrm{d}x$$

当初态与末态同宇称时，被积函数为奇的，定时 $\langle x\rangle_{kk'}$ 为零. 故一般的电偶极跃迁选择定则为同宇称态之间的电偶极跃迁是禁戒的.

8.27　一维无限深势阱中对微扰 $\Delta V(x)=kx$ 无能量一级效应及电偶极辐射选择定则

题 8.27　考虑一维无限深势阱中的一个粒子(题图 8.27). 令原点位于势阱中心. (1) 所允许的能量是多少? (2) 所允许的波函数是什么? (3) 对哪类解微扰势 $\Delta V(x)=kx$ 对能量无第一级效应? (4) 若态之间可发生偶极辐射跃迁，则选择定则是什么?



题图 8.27

解　(1) 所允许的能量为

$$E_n=\frac{\hbar^2\pi^2n^2}{8ma^2},\qquad n=1,2,\cdots$$

(2) 所允许的波函数有两类，一类是偶宇称解

$$\psi_n^+(x)=\sqrt{\frac{1}{a}}\cos\frac{\pi nx}{2a},\qquad n=\text{奇数}$$

另一类是奇宇称解

$$\psi^-(x)=\sqrt{\frac{1}{a}}\sin\frac{\pi nx}{2a},\qquad n=\text{偶数}$$

(3) 一级微扰下能量为

$$E_n=E_n^{(0)}+\langle\Delta V\rangle_{nn}=E_n^0+\langle kx\rangle_{nn}$$

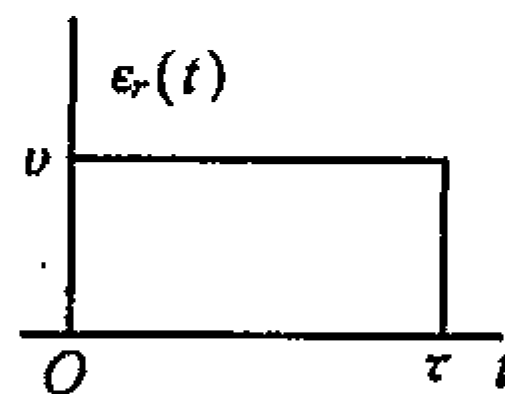
由于$\Delta V=kx$为奇的，其对角矩阵元均为零. 也就是说，只要波函数有确定的宇称(不论奇偶)在一级微扰下就无能量修正. 只有对宇称的混合态，才可能有对 kx 的一级微扰修正.

(4) 偶极辐射跃迁与$\langle x\rangle_{kk'}$有关

与题 8.26 类同，只有不同宇称的态之间跃迁是允许的，同宇称态之间的电偶极跃迁是禁戒的.

8.28　初始为δ函数势下的束缚态粒子在匀强电场作用后处于非束薄态的概率

题 8.28　一个做一维运动的，电荷为 q 的粒子，初始时受到位于原点的δ-函数势束缚. 从 $t=0$ 到 $t=\tau$ 这段时间内，该粒子受到一沿 X 方向的匀强电场 ε_0 作用. 本题的目的是求出 $t>\tau$ 时该粒子处于一个能量范围在 E_k 和 $E_k+\mathrm{d}E_k$ 之间的非束缚的概率. (1) 求对应于δ-函数势 $V(x)=-A\delta(x)$ 的归一化束缚态能量本征函数. (2) 假设非束缚态可用满足箱长度为 L 的周期性边界条件的自由粒子态来近似. 求波矢为 k 的归一化波函数 $\psi_k(x)$，求其态密度，并表为 k 的函数 $D(k)$和自由粒子能量 E_k 的函数 $D(E_k)$. (3) 假设电场可以当作微扰处理. 写下 Hamilton 量中的微扰项 $\widehat{H}_1$，并求 $\widehat{H}_1$ 在初态和末态间的矩阵元$\langle k|\widehat{H}_1|0\rangle$. (4) 由于弱微扰哈密顿量 $\widehat{H}_1(t)$ 引起的，从初态$|I\rangle$到末态$|F\rangle$的跃迁概率为



题图 8.28

$$P_{I\to F}(t)=\frac{1}{\hbar^2}\left|\int_{-\infty}^{+}\langle F|\widehat{H}_1(t')|I\rangle e^{i\omega_{FI}t}\mathrm{d}t'\right|^2$$

式中，$\omega_{FI}\equiv(E_F-E_I)/\hbar$. 求 $t>\tau$ 时粒子处于一个能量范围在 E_k 和 $E_k+\mathrm{d}E_k$ 之间的非束缚态的概率 $P(E_k)\mathrm{d}E_k$ 的表达式.

解　(1) 能量本征方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}-A\delta(x)\psi=E\psi,\qquad E<0$$

即

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}-k^2\psi+A_0\delta(x)\psi=0$$

式中

$$k=\sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}},\qquad A_0=\frac{2mA}{\hbar^2}$$

方程两边求积分$\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\mathrm{d}x$($\varepsilon$是任意小正数). 并令$\varepsilon\to0$，得

$$\psi'(+0)-\psi'(-0)=-A_0\psi(0)$$

或者

$$\frac{\psi'(+0)}{\psi(+0)}-\frac{\psi'(-0)}{\psi(-0)}=-A_0$$

另外，从 $x\neq 0$ 的 Schrödinger 方程解出

$$\psi(x)=ce^{-kx}$$

于是

$$\frac{\psi'(+0)}{\psi(+0)}-\frac{\psi'(-0)}{\psi(-0)}=-2k$$

所以

$$k=\frac{A_0}{2}=\frac{mA}{\hbar^2}$$

束缚态能级为

$$E=-\frac{\hbar^2k^2}{2m}=-\frac{mA^2}{2\hbar^2}$$

相应的归一化本征函数为

$$\psi(x)=\sqrt{\frac{mA}{\hbar^2}}\exp\left(-\frac{mA}{\hbar^2}|x|\right)$$

(2) 设非束缚态可以近似地用平面波 e^{ikx} 表征，在长度为 L 的一维箱上的周期性边界条件给出

$$\exp\left[ik\left(-\frac{L}{2}\right)\right]=\exp\left(ik\frac{L}{2}\right)$$

即

$$e^{ikL}=1$$

所以

$$kL=2n\pi,\qquad n=0,\ \pm 1,\ \pm 2,\ \cdots$$

$$k=\frac{2n\pi}{L}=k_n$$

波矢为 k 的(箱式)归一化平面波为

$$\psi_k(x)=\frac{1}{\sqrt{L}}e^{ikx}=\frac{1}{\sqrt{L}}\exp\left[i\left(\frac{2n\pi}{L}x\right)\right]=\psi_n(x)$$

注意 $k\neq 0$ 时能量 E_k 二重简并，则动量位于 $p\to p+\mathrm{d}p$ 间隔中的状态数为

$$\frac{L\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}=D(k)\mathrm{d}k=\frac{1}{2}D(E_k)\mathrm{d}E_k$$

波矢 k，能量 E_k 与动量 p 的关系如下

$$k=\frac{p}{\hbar},\qquad E_k=\frac{\hbar^2k^2}{2m}=\frac{p^2}{2m}$$

于是

$$D(k)=\frac{L}{2\pi},\qquad D(E_k)=\frac{L}{\pi\hbar}\sqrt{\frac{m}{2E_k}}$$

(3) 微扰 Hamilton 量为

$$H_1=-q\varepsilon_0x$$

可以认为 L 很大，这样 H_1 在初、末态间的矩阵元可表为 $(k_0=mA/\hbar^2)$

$$\langle k|H_1|0\rangle=-\frac{q\varepsilon_0}{\sqrt{L}}\sqrt{\frac{mA}{\hbar^2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\cdot x\exp\left(-\mathrm{i}kx-k_0|x|\right)$$

$$=-\frac{q\varepsilon_0}{\sqrt{L}}\sqrt{\frac{mA}{\hbar^2}}\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\exp\left(-\mathrm{i}kx-k_0|x|\right)$$

$$=-\frac{q\varepsilon_0}{\sqrt{L}}\sqrt{\frac{mA}{\hbar^2}}(-4\mathrm{i}kk_0)\frac{1}{\left(k^2+k_0^2\right)^2}$$

$$=\frac{4\mathrm{i}q\varepsilon_0}{\sqrt{L}}\left(\frac{mA}{\hbar^2}\right)^{3/2}\frac{k}{\left[k^2+\left(\frac{mA}{\hbar^2}\right)^2\right]^2}$$

(4) 为明确起见，将微扰记成

$$H_1=\begin{cases}0, & -\infty<t<0\\ -q\varepsilon_0x, & 0\leqslant t\leqslant\tau\\ 0, & \tau<t<+\infty\end{cases}$$

注意到 H_1 是常微扰，所以 $t>\tau$ 时的跃迁概率为

$$P_{I\to F}(t)=\frac{1}{\hbar^2}\left|\langle k|H_1|0\rangle\right|^2\left|\int_0^{\tau}\mathrm{d}t'\exp(\mathrm{i}\omega_{FI}t')\right|^2$$

$$=\frac{1}{\hbar^2}\left|\langle k|H_1|0\rangle\right|^2\frac{\sin^2(\omega_{FI}\tau/2)}{(\omega_{FI}/2)^2}$$

注意到态密度 $D(E_k)$ 和矩阵元 $\langle k|H_1|0\rangle$ 的表达式，以及 (E_F-E_I = 非束缚态能量−束缚态

能量)

$$\frac{\sin^2(\omega_{FI}\tau/2)}{(\omega_{FI}/2)^2}=\frac{\sin^2\left\{\frac{\hbar\tau}{4m}\left[k^2+\left(\frac{mA}{\hbar^2}\right)^2\right]\right\}}{\left\{\frac{\hbar}{4m}\left[k^2+\left(\frac{mA}{\hbar^2}\right)^2\right]\right\}^2},$$

即得所求的概率

$$P(E_k)\mathrm{d}E_k=P_{I\to F}(t)D(E_k)\mathrm{d}E_k$$

$$=\frac{(16q\varepsilon_0)^2m^3k_0^3}{\pi\hbar^7\left(k_0^2+\frac{2mE_k}{\hbar^2}\right)^6}\sqrt{2mE_k}\sin^2\frac{\hbar\tau}{4m}\left(k_0^2+\frac{2mE_k}{\hbar^2}\right)\mathrm{d}E_k$$

$$=\frac{(16q\varepsilon_0)^2m^3\left(\frac{mA}{\hbar^2}\right)^3}{\pi\hbar^7\left[\left(\frac{mA}{\hbar^2}\right)^2+\frac{2mE_k}{\hbar^2}\right]^6}\sqrt{2mE_k}\sin^2\left\{\frac{\hbar\tau}{4m}\left[\left(\frac{mA}{\hbar^2}\right)^2+\frac{2mE_k}{\hbar^2}\right]\right\}\mathrm{d}E_k$$

8.29　能级差为$\hbar\omega_{12}$的两能级原子在电磁辐射(频率ω)作用下的跃迁概率

题 8.29　设有一个两能级原子，它具有能级差为$E_2-E_1=\hbar\omega_{12}$的两个态$|1\rangle$和$|2\rangle$. 一开始，原子处于其基态$|1\rangle$，现受到电磁辐射$\boldsymbol{E}=\boldsymbol{E}_m(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t})$的作用. (1) 若$\omega=\omega_{12}$计算过一段时间$t$后，原子处于态$|2\rangle$的概率. (2) 若$\omega$只是近似地等于$\omega_{12}$，这同上面的情况有何定性的差别? 重新计算上述概率.

解

$$H_0|1\rangle=E_1|1\rangle=\hbar\omega_1|1\rangle$$

$$H_0|2\rangle=E_2|2\rangle=\hbar\omega_2|2\rangle$$

加上电磁辐射作用后，$H=H_0+H'$

$$H'=-e\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{E}_m(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t})$$

求解方程$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|t\rangle=H|t\rangle$，初始条件$|t=0\rangle=|1\rangle$. 设解具有形式

$$|t\rangle=c_1(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_1t}|1\rangle+c_2(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_2t}|2\rangle$$

$$c_1(0)=1,\qquad c_2(0)=0$$

则

$$\mathrm{i}\hbar\left(\dot{c}_1\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_1t}|1\rangle-\mathrm{i}c_1\omega_1\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_1t}|1\rangle+\dot{c}_2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_2t}|2\rangle-\mathrm{i}c_2\omega_2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_2t}|2\rangle\right)$$

$$=c_1\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_1t}\hbar\omega_1|1\rangle+c_2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_2t}\hbar\omega_2|2\rangle+c_1\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_1t}H'|1\rangle+c_2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_2t}H'|2\rangle$$

化简得

$$i\hbar\dot{c}_1 e^{-i\omega_1 t}|1\rangle + i\hbar\dot{c}_2 e^{-i\omega_2 t}|2\rangle = c_1 e^{-i\omega_1 t}H'|1\rangle + c_2 e^{-i\omega_2 t}H'|2\rangle$$

用左矢 $\langle 1|$ 和 $\langle 2|$ 乘这个方程的两端，得

$$i\hbar\dot{c}_1 = c_1\langle 1|H'|1\rangle + c_2 e^{-i(\omega_2-\omega_1)t}\langle 1|H'|2\rangle$$

$$i\hbar\dot{c}_2 = c_1 e^{i(\omega_2-\omega_1)t}\langle 2|H'|1\rangle + c_2\langle 2|H'|2\rangle$$

令 $\langle i|-e\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{E}_m|j\rangle = \hbar a_{ij}$，上式可以写成

$$i\hbar\dot{c}_1 = c_1(e^{i\omega t}+e^{-i\omega t})\hbar a_{11} + c_2 e^{-i\omega_{21}t}(e^{i\omega t}+e^{-i\omega t})\hbar a_{12}$$

$$i\hbar\dot{c}_2 = c_1 e^{i\omega_{21}t}(e^{i\omega t}+e^{-i\omega t})\hbar a_{21} + c_2(e^{i\omega t}+e^{-i\omega t})\hbar a_{22}$$

式中，用了记号 $\omega_{21}=\omega_2-\omega_1$.

如果 E_m 很小且 $\omega_{21}\sim\omega$ 时，我们可以略去上式中快速振荡的那些项，即只保留含 $e^{i(\omega_{21}-\omega)t}$ 的那些项.

$$\dot{c}_1 = -ia_{12}c_2 e^{i(\omega-\omega_{21})t}$$

$$\dot{c}_2 = -ia_{21}c_1 e^{i(\omega_{21}-\omega)t}$$

消去 c_1，得出关于 c_2 的二阶微分方程

$$\begin{cases} \ddot{c}_2 = i(\omega_{21}-\omega)\dot{c}_2 - a_{12}a_{21}c_2 = 0 \\ c_2(0)=0, \quad \dot{c}_2(0) = -ia_{21}c_1(0) = -ia_{21} \end{cases}$$

(1) $\omega=\omega_{21}$，记 $a_{12}a_{21}=|a_{12}|^2=\Omega^2$，显然所求解为

$$c_2(t) = -i\frac{a_{21}}{\Omega}\sin\Omega t$$

因此在时刻 t 处于态 $|2\rangle$ 的概率为

$$|c_2(t)|^2 = \sin^2\Omega t$$

(2) $\omega\approx\omega_{21}$

$$c_2 = Ae^{i\lambda+t} + Be^{i\lambda-t}$$

式中

$$\lambda\pm = \frac{1}{2}\left[(\omega_{21}-\omega)\pm\sqrt{(\omega_{21}-\omega)^2+4|a_{12}|^2}\right]$$

$$\equiv\frac{1}{2}[(\omega_{21}-\omega)\pm\Lambda]$$

由 $c_2(0)=0$, $\dot{c}_2(0)=-ia_{21}$ 可得

$$c_2(t) = -\frac{2ia_{21}}{\Lambda}\exp\left(i\frac{(\omega_{21}-\omega)}{2}t\right)\sin\frac{\Lambda}{2}t$$

所以处于态 $|2\rangle$ 的概率为

$$|c_2(t)|^2 = \frac{4|a_{21}|^2}{\Lambda}\sin^2\frac{\Lambda}{2}t$$

8.30 已知 HCl 分子在吸收线，判断是振动跃迁还是转动跃迁

题 8.30 在 HCl 分子中观察到了波数(以 cm^{-1} 作单位)为 83.03, 103.73, 124.30, 145.03, 165.51 和 185.86 的吸收线. 这些是振动跃迁还是转动跃迁？若是前者，它的特征频率是多少？若是后者，它所对应的 J 值是多少？HCl 的惯量矩是多少？若是那样的话，估计两核子的间距.

解　由双原子分子光谱知识可知，像这样波数间隔近似相同的谱线属转动谱不可能是振动谱. 后者由分子转动能级等间距及跃迁选择规则限制只有一条谱线出现.

由双原子分子转动能级为 $E_l = \frac{\hbar^2}{2I}J(J+1)$ 和选择规则 $|\Delta J| = 1$ 可知谱线的波数间隔为

$$hc\Delta\left(\frac{1}{\lambda}\right) = \frac{\hbar}{2I}\cdot 2 = \frac{\hbar^2}{I}$$

所以

$$I = \frac{\hbar^2}{hc\Delta\left(\frac{1}{\lambda}\right)}$$

又由上面可推知由 $J \to J-1$ 能级时，谱线的能量为 $\frac{\hbar^2}{2I}2J = \frac{\hbar^2}{I}J$. 故由此可知谱线的能量正比于 J . 这样由所给的波数(由于 $E = hc\tilde{\nu}$ 可知 $E \propto \tilde{\nu}$)可知

$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda}(cm^{-1})$	跃迁 $(J \to J-1)$	$\Delta\left(\frac{1}{\lambda}\right)(cm^{-1})$
83.03	$4 \to 3$	
		20.70
103.73	$5 \to 4$	
		20.57
124.30	$6 \to 5$	
		20.73
145.03	$7 \to 6$	
		20.48
165.51	$8 \to 7$	
		20.35
185.86	$9 \to 8$	

$$\overline{\left(\Delta\frac{1}{\lambda}\right)} = 20.57(cm^{-1})$$

所以

$$I = \frac{\hbar^2}{hc\Delta\left(\frac{1}{\lambda}\right)}$$

$$= \frac{6.63\times10^{-34}}{(2\pi)^2\times3.0\times10^8\times20.57\times10^2}$$

$$= 2.72\times10^{-48}(kg\cdot m^2)$$

又

$$I = \mu R^2, \qquad \mu^{-1} = m_{\mathrm{H}}^{-1} + m_{\mathrm{Cl}}^{-1}，R \text{ 为两核间距}$$

所以

$$R = \left[\frac{(m_{\mathrm{H}} + m_{\mathrm{Cl}})I}{m_{\mathrm{H}} \cdot m_{\mathrm{Cl}}}\right]^{1/2}$$

$$= \left[\frac{(1+35)}{1 \times 35 \times 1.66 \times 10^{-29}} \times 2.72 \times 10^{-47}\right]^{1/2}$$

$$= 1.30 \times 10^{-10}(\mathrm{m}) = 1.30(\text{Å})$$

8.31　在 $H'(t) = H_0 \mathrm{e}^{-t/T}$ 下由 $|0\rangle$ 到 $|1\rangle$ 态的跃迁概率

题 8.31　考虑一最初处于基态 $|0\rangle$ 的任意量子力学系统. 在 $t = 0$ 时刻. 加上一形式为 $H'(t) = H_0 \mathrm{e}^{-t/T}$ 的扰动. 证明在很长时间后，系统处于态 $|1\rangle$ 的概率由下式给定

$$\frac{|\langle 0|H_0|1\rangle|^2}{(\hbar/T) + (\Delta\varepsilon)^2}$$

式中，$\Delta\varepsilon$ 是态 $|0\rangle$ 和态 $|1\rangle$ 间的能级差. 指出在得到你的结论过程中应用了什么假设.

证明　应用含时微扰跃迁概率公式 $c_{k'k}(t) = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^t \mathrm{d}t' H'_{k'k} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{k'k}t'}$

$$c_{10}(t) = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^\infty \mathrm{d}t \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{10}t} \mathrm{e}^{-t/T} \langle 1|H_0|0\rangle$$

$$= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar} \frac{1}{\left(\frac{1}{T} - \mathrm{i}\omega_{10}\right)} \langle 1|H_0|0\rangle$$

$$= \frac{1}{\mathrm{i}(\hbar/T) + \Delta\varepsilon} \langle 1|H_0|0\rangle, \qquad \Delta\varepsilon = \omega_{10}\hbar$$

式中，$\Delta\varepsilon$ 是态 $|0\rangle$ 和态 $|1\rangle$ 间的能级差. 所以系统处于态 $|1\rangle$ 的概率为

$$P_{10} = |c_{10}(t)|^2 = \frac{|\langle 0|H_0|1\rangle|}{\hbar^2/T^2 + (\Delta\varepsilon)^2}$$

上述计算中假设 H_0 很小，从而可作微扰处理. 因为所用的跃迁概率公式为一级近似解.

8.32　立方盒中的带电粒子在 $\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_0 \mathrm{e}^{-\alpha t}$ 作用时从基态到第一激发态的概率

题 8.32　一个电荷为 e 的粒子被禁闭在各边为 $2b$ 的立方盒子中，给定一个电场

$$\boldsymbol{E} = \begin{cases} 0, & t < 0 \\ \boldsymbol{E}_0 \mathrm{e}^{-\alpha t}, & t > 0 \end{cases} \qquad \alpha \text{ 为正常数}$$

$\boldsymbol{E}_0$垂直于盒子的某一面. $t=0$时. 带电粒子处于基态,求$t=\infty$时粒子处于第一激发态的概率. 计算到E_0的最低阶(可将结果保留在无量纲定积分的形式).

解　取势如下

$$V(x,\ y,\ z)=\begin{cases}0, & 0<x<2b,\ 0<y<2b,\ 0<z<2b\\ \infty, & \text{其他}\end{cases}$$

零级波函数为(在盒子内)

$$\psi_{lmn}(x,\ y,\ z)=\sqrt{\frac{1}{b^3}}\sin\frac{l\pi x}{2b}\sin\frac{m\pi y}{2b}\sin\frac{n\pi z}{2b}$$

基态$|111\rangle$，第一激发态$|211\rangle,|121\rangle,|112\rangle$.

设$\boldsymbol{E}_0=E_0\boldsymbol{e}_x$，则$H'=-eE_0x\mathrm{e}^{-\alpha t}$，于是

$$\langle 111|x|211\rangle=\frac{1}{b}\int_0^{2b}x\sin\frac{\pi x}{2b}\sin\frac{\pi x}{b}\mathrm{d}x=-\frac{32b}{9\pi^2}$$

$$\langle 111|x|121\rangle=\langle 111|x|112\rangle=0$$

所以

$$P=\frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^{\infty}\langle 211|H'|111\rangle\exp\left(\frac{\mathrm{i}\Delta Et}{\hbar}\right)\mathrm{d}t\right|^2$$

$$\Delta E=\frac{3\pi^2\hbar^2}{8mb^2}$$

$$P=\left(\frac{32beE_0}{9\hbar\pi^2}\right)^2\left|\int_0^{\infty}\exp\left(-\alpha t+\mathrm{i}\frac{\Delta Et}{\hbar}\right)\mathrm{d}t\right|^2$$

$$=\left(\frac{32beE_0}{9\hbar\pi^2}\right)^2\frac{\hbar^2}{\alpha^2\hbar^2+\Delta E^2}$$

8.33　束缚于谐振子势中的铝核由$\psi_0(x)\phi_1$衰变到ϕ_0，并发射光子后处于ψ_1与ψ_2概率比

题 8.33　一个 ^{27}Al 核被束缚在自然频率为ω的一维谐振子势阱中，记各态为$\psi_{m\alpha}=\psi_m(x)\phi_\alpha$，其中$\psi_m(x)(m=0,\ 1,\ 2,\ \cdots)$是谐振子势场中的本征态，描写质心运动；而$\phi_\alpha(\alpha=0,\ 1,\ 2,\ \cdots)$为确定核的内部状态的波函数. 假定核一开始处于状态$\psi_0(x)\phi_1$，然后衰变到基态ϕ_0，同时在 x 方向上发射一个光子. 假定核激发能比谐振子激发能大得多：$E^*=(E_{\alpha=1}-E_{\alpha=0})\gg\hbar\omega$.(1) 发射光子后核的波函数为何? (2) 计算相对概率P_1/P_0，其中 P_n 是核子处于态$\psi_{n0}=\psi_n(x)\phi_0$的概率. (3) 设$E^*=840\text{keV}$, $\hbar\omega=1\text{keV}$, 估计P_1/P_0的数值.

解　(1) 注意到向左(负x方向)发射光子后，原子核以一定的速度$v=\dfrac{E^*}{mc}$向右反冲. 按题意，核应处于随核一起运动的参考系中内禀波函数的基态$\phi_0(x')$. 其中x'是随动系

中的坐标 $x'=x-vt$. 在伽利略变换下，若 $x'=x-vt$，$t'=t$，波函数按下列方式变换

$$\psi(x,t)=\exp\left(\mathrm{i}\frac{mv^2}{2\hbar}t'+\mathrm{i}\frac{mv}{\hbar}x'\right)\psi'(x',t')$$

因此，在发射光子后，原子核实际上处于态

$$\psi(x,0)=\exp\left(\mathrm{i}\frac{mv}{\hbar}x\right)\psi_0(x)\phi_0,\qquad t=0,\quad x=x'$$

(2)

$$\begin{aligned}P_n&=\left|\langle\psi_{n0}|\psi(x,\ 0)\rangle\right|^2\\&=\left|\left\langle\psi_n(x)\phi_0\left|\exp\left(\mathrm{i}\frac{mv}{\hbar}x\right)\right|\phi_0\psi_0(x)\right\rangle\right|^2\\&=\left|\left\langle n\left|\exp\left(\mathrm{i}\frac{mv}{\hbar}x\right)\right|0\right\rangle\right|^2\end{aligned}$$

式中，$|n\rangle=|\psi_n(x)\rangle$. 利用产生和消灭算符，$x=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a^\dagger+a)$，且 $e^{A+B}=e^Ae^Be^{-\frac{1}{2}[A,B]}$ ($[A,\ B]$ 与 A、B 对易)，有

$$\begin{aligned}P_n&=\left|\left\langle n\left|\exp\left(\mathrm{i}\frac{mv}{\hbar}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\right)(a^\dagger+a)\right|0\right\rangle\right|^2\\&=\left|\left\langle n\left|\exp\left(\mathrm{i}\frac{mv}{\hbar}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}a^\dagger\right)\exp\left(\mathrm{i}\frac{mv}{\hbar}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}a\right)\exp-\left(\frac{mv^2}{4\hbar\omega}\right)\right|0\right\rangle\right|^2\\&=\exp\left(-\frac{mv^2}{2\hbar\omega}\right)\left|\sum_{m,l=0}^{\infty}\frac{\left(\mathrm{i}\sqrt{\frac{mv^2}{2\hbar\omega}}\right)^m}{m!}\frac{\left(\mathrm{i}\sqrt{\frac{mv^2}{2\hbar\omega}}\right)^l}{l!}\langle n|(a^\dagger)^m a^l|0\rangle\right|^2\left(-\frac{mv^2}{2\hbar\omega}\right)\left|\frac{\left(\mathrm{i}\sqrt{\frac{mv^2}{2\hbar\omega}}\right)^n}{n!}\sqrt{n!}\right|^2\end{aligned}$$

即

$$P_n=\frac{1}{n!}\left(\frac{\frac{1}{2}mv^2}{\hbar\omega}\right)^n\exp\left(-\frac{\frac{1}{2}mv^2}{\hbar\omega}\right)$$

所以

$$\frac{P_1}{P_0}=\frac{mv^2}{2\hbar\omega}\approx\frac{E^{*2}}{2mc^2\hbar\omega}=\frac{(840\mathrm{keV})^2}{2\times27\times931.5\mathrm{MeV}\times1\mathrm{keV}}\approx1.4\times10^{-2}$$

8.34 求铝核类氢 μ 原子从 3d 态衰变时发射光子的波长及衰变寿命

题 8.34 考虑一个 μ 子被铝核(Z = 13)俘获的情形. 当 μ 子进入"电子云"的内层之后，它就与铝核形成一个类氢 μ 原子. μ 子的质量为105.7 MeV. (1) 当这个 μ 原子从 3d 态衰变时，计算所发射光子的波长(Å). (2) 注意到 3d 态氢原子寿命为1.6×10^{-8} s 这一事实，计算 3d 态的上述 μ 原子的寿命.

解 (1) 跃迁概率最大的是$3\text{d}\to2\text{p}$. 在非相对论近似下，我们求出光子能量为

$$h\nu = E_3 - E_2 = \frac{me^4z^2}{2\hbar^2}\left(\frac{1}{2^2}-\frac{1}{3^2}\right) = 13.6\times13^2\times\frac{105.7}{0.51}\times\left(\frac{1}{2^2}-\frac{1}{3^2}\right) = 66\,690\text{eV}$$

相应的波长为

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{\hbar c}{h\nu} = \frac{2\pi\times1.97\times10^{-11}\text{MeV}\cdot\text{cm}}{66\,690\text{eV}}1.86\times10^{-9}\text{cm}$$

(2) 自发辐射系数

$$A \propto \omega^3|r_{kk}|^2, \qquad \tau\propto A^{-1}$$

注意到$|r_{kk'}|\propto\dfrac{1}{z}$，则我们得出 3d 态 μ 原子寿命为

$$\tau = \tau_0\frac{\omega_0^3}{\omega^3}\cdot\frac{|r_{kk'}|_0^2}{|r_{kk'}|^2} = \tau_0 z^2\frac{\omega_0^3}{\omega^3} = \tau_0 z^2\frac{1}{z^2\dfrac{m}{m_e}}$$

$$= \frac{m_e}{m}\tau_0 = \frac{0.51}{105.7}\times1.6\times10^{-8}\text{s} = 7.72\times10^{-11}\text{s}$$

8.35 在吸引势 $k(x^2+y^2+z^2)$ 中运动粒子在小磁场下能级修正及微扰势 $Ax\cos\omega t$ 下的跃迁

题 8.35 一个质量 m，电荷 e，自旋为零的粒子在吸引势$k(x^2+y^2+z^2)$中运动. 略去相对论效应. (1) 求三个最低能级 E_0，E_1，E_2；在每一情况下说明简并度. (2) 假设粒子受到一个 z 方向的，小的常磁场 B 的微扰. 仅考虑未微扰能量 E_2 对应的态，求出能量的微扰修正. (3) 假设小微扰势 $Ax\cos\omega t$ 在(1)中不同的态之间引起跃迁. 运用比较方便的简并态基，详细确定允许的跃迁. 略去正比于 A^2 的效应或 A 的更高次方的贡献. (4) 在(3)中，假设 $t=0$ 时粒子处于基态. 求在 t 时刻能量是 E_1 的概率. (5) 对于没受微扰时的 Hamilton 量，哪些是运动常数?

解 (1) 在直角坐标系中，运动方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+k(x^2+y^2+z^2)\right]\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$$

分解为三个一维谐振子后，求得能量为

$$E_N = E_l + E_m + E_n = \frac{3}{2}\hbar\omega + (l+m+n)\hbar\omega$$

$$\omega = \sqrt{2k/m} \qquad N = l+m+n = 0,\ 1,\ 2,\ \cdots$$

所以 $E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega = \frac{3}{2}\hbar\sqrt{2k/m}$，没有简并；

$E_1 = \frac{5}{2}\hbar\omega = \frac{5}{2}\hbar\sqrt{2k/m}$，简并度为 3($\psi_{100}$，$\psi_{010}$，$\psi_{001}$)；

$E_2 = \frac{7}{2}\hbar\omega = \frac{7}{2}\hbar\sqrt{2k/m}$，简并度为 6($\psi_{200}$，$\psi_{020}$，$\psi_{002}$，$\psi_{110}$，$\psi_{101}$，$\psi_{011}$).

在球坐标系下解得

$$\psi_{Nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{n_r l}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$$R_{n_r l}(r) = \alpha^{3/2}\left[\frac{2^{l+2-n_r}(2l+2n_r+1)!!}{\sqrt{\pi}n_r![(2l+1)!!]^2}\right]^{1/2}, \qquad (\alpha r)^l e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2} F - n_r, l+3/2, \alpha^2 r^2$$

$$E_N = \left(N+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega, \qquad N = 0,\ 1,\ 2,\cdots$$

$$l = N - 2n_r = \begin{cases} 0,\ 2,\ \cdots,\ N, & N\text{偶} \\ 1,\ 3,\ \cdots,\ N, & N\text{奇} \end{cases}$$

简并度

$$f_N = \frac{1}{2}(N+1)(N+2)$$

(2) 对于小磁场，有

$$H = -\frac{eB}{2mc}L_n$$

选择球坐标系，有

$$E_{Nlm'} = E_{Nl} - \frac{eB}{2mc}m'\hbar$$

所以对于 E_2 能级所对应的态，能量的修正分别为

$$E_{200} = E_{20}$$

$$E_{222} = E_{22} - \frac{eB}{mc}\hbar$$

$$E_{221} = E_{22} - \frac{eB}{2mc}\hbar$$

$$E_{220} = E_{22}$$

$$E_{22-1} = E_{22} + \frac{eB}{2mc}\hbar$$

$$E_{22-2} = E_{22} + \frac{eB}{mc}\hbar$$

简并度部分解除四条能级发生变化.

(3) 此时 $H' = Ax\cos\omega t$. 取直角坐标系中三维谐振子的表示，则考虑到 A 的一阶时的

微扰贡献为

$$\begin{aligned}\langle l'm'n'|H'(x,t)|lmn\rangle &= \delta_{m'm}\delta_{n'n}\langle l'|H'(x,t)|l\rangle \\ &= A\cos\omega t\delta_{mm'}\delta_{n'n}\langle l'|x|l\rangle \\ &= A\alpha^{-1}\cos\omega t\left(\sqrt{\frac{l+1}{2}}\delta_{l,l+1}+\sqrt{\frac{l}{2}}\delta_{l',l-1}\right)\delta_{m'm}\delta_{n'n}\end{aligned}$$

式中，$\alpha=\sqrt{m\sqrt{2k/m}/\hbar}=(2km/\hbar^2)^{1/4}$(这里 m 是质量). 得到跃迁的选择定则

$$\Delta m=\Delta n=0$$

$$\Delta l=\pm 1$$

(4) 显然只有ψ_{000}跃迁到ψ_{100}，所以

$$P_{10}=\frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t H'_{10}e^{i\omega' t}dt\right|^2=\frac{A^2}{2\alpha^2\hbar^2}\left|\int_0^t\cos\omega t e^{i\omega t}dt\right|^2$$

式中，$\omega'=\sqrt{\frac{2k}{m}}$， $H'_{10}=\langle 100|H'|000\rangle$

$$\begin{aligned}\int_0^t\cos\omega t e^{i\omega t}dt &= \frac{1}{2}\int_0^t(e^{i\omega t}+e^{-i\omega t})e^{i\omega' t}dt \\ &= \frac{1}{2i}\left[\frac{e^{i(\omega'+\omega)t}-1}{\omega'+\omega}+\frac{e^{i(\omega'-\omega)t}-1}{\omega-\omega'}\right]\end{aligned}$$

对微观世界，通常ω，ω'很大，则只有当$\omega\sim\omega'$时，上式才有显著贡献，所以

$$P_{10}=\frac{A^2}{8\alpha^2\hbar^2}\cdot\frac{\sin^2[(\omega'-\omega)t/2]}{[(\omega'-\omega)/2]^2}$$

当t充分大时

$$P_{10}=\frac{A^2\pi t}{8\alpha^2\hbar^2}\delta\left(\frac{\omega'-\omega}{2}\right)=\frac{A^2\pi t}{4\alpha^2\hbar^2}\delta(\omega'-\omega)$$

(5) 能量，角动量，角动量第三分量，宇称是运动常数.

8.36 质子系统在恒磁场及旋转磁场作用下，系统的自旋波函数

题 8.36 一个质子系统处于一稳定的沿 z 方向的均匀磁场 $\boldsymbol{B}$ 中，在 xy 平面上有一旋转磁场 $\boldsymbol{B}$

$$\boldsymbol{B}'=B'\cos\omega t\boldsymbol{e}_x-B'\sin\omega t\boldsymbol{e}_y$$

(1) 证明系统的 Hamilton 量为

$$H=H^{(0)}+H^{(1)}$$

式中

$$H^{(0)}=-\frac{1}{2}\hbar\omega_L\sigma_z,\qquad \omega_L=\gamma_P B$$

$$H^{(1)}=-\frac{1}{2}\hbar\omega'(\sigma_x\cos\omega t-\sigma_y\sin\omega t),\qquad \omega'=\gamma_P B'$$

式中，σ_x、σ_y、σ_z 是 Pauli 自旋算符，γ_P 为回转磁率.

(2) 设系统的自旋波函数为

$$\psi(t)=C_\alpha\exp(\mathrm{i}\omega_2 t/2)\alpha+C_\beta\exp(-\mathrm{i}\omega_2 t/2)\beta$$

这里 α 、β 为 σ_z 的本征态，证明 C_α 和 C_β 满足下列关系

$$\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}C_\alpha}{\mathrm{d}t}=\dfrac{1}{2}\mathrm{i}\omega'\exp(\mathrm{i}qt)C_\beta\\[2ex]\dfrac{\mathrm{d}C_\beta}{\mathrm{d}t}=\dfrac{1}{2}\mathrm{i}\omega'\exp(-\mathrm{i}qt)C_\alpha, \qquad q=\omega-\omega_\mathrm{L}\end{cases}$$

(3) 若 $t=0$ 时，质子系统都处于 α 态，证明 t 时刻

$$\left|C_\beta(t)\right|^2=\frac{\omega'^2}{q^2+\omega'^2}\sin^2\left(\sqrt{q^2+\omega'^2}\,t/2\right)$$

(4) 将上面严格的 $\left|C_\beta(t)\right|^2$ 的表达式与一阶微扰求出的表达式相比较.

解　(1) 质子的磁偶极矩为 $\gamma_P(\hbar/2)\sigma_z$，所以有

$$H^{(0)}=-\gamma_P\frac{\hbar}{2}B\sigma_z=-\frac{\hbar}{2}\omega_\mathrm{L}\sigma_z$$

$$H^{(1)}=-\gamma_P\frac{\hbar}{2}B'(\sigma_x\cos\omega t-\sigma_y\sin\omega t)$$

$$=-\frac{\hbar}{2}\omega'(\sigma_x\cos\omega t-\sigma_y\sin\omega t)$$

(2) 因为 $H^{(0)}$ 的本征态为 α 、β，相应的本征值为

$$E_\alpha=-\frac{\hbar}{2}\omega_\mathrm{L}, \qquad E_\beta=\frac{\hbar}{2}\omega_\mathrm{L}$$

系统的 Schrödinger 方程为

$$\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}H\psi=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(H^{(0)}+H^{(1)})\psi \tag{1}$$

设其解为

$$\psi=C_\alpha\exp(\mathrm{i}\omega_\mathrm{L}t/2)\alpha+C_\beta\exp(-\mathrm{i}\omega_\mathrm{L}t/2)\beta \tag{2}$$

因为有关系式

$$\begin{cases}\sigma_x\alpha=\beta, \quad \sigma_y\alpha=\mathrm{i}\beta, \quad \sigma_z\alpha=\alpha\\[2ex]\sigma_x\beta=\alpha, \quad \sigma_y\beta=-\mathrm{i}\alpha, \quad \sigma_z\beta=-\beta\end{cases}$$

它导致

$$\begin{cases}H\alpha=-\dfrac{\hbar}{2}[\omega_\mathrm{L}\alpha t\omega'\exp(-\mathrm{i}\omega t)\beta]\\[2ex]H\beta=-\dfrac{\hbar}{2}[-\omega_\mathrm{L}\beta+\omega'\exp(\mathrm{i}\omega t)\alpha]\end{cases} \tag{3}$$

将式(2)代入式(1)，并利用式(3)，可得

$$\dot{C}_\alpha \exp(\mathrm{i}\omega_{\mathrm{L}}t/2)\alpha + \dot{C}_\beta \exp(-\mathrm{i}\omega_{\mathrm{L}}t/2)\beta$$

$$=\frac{1}{2}\mathrm{i}\omega' \exp(\mathrm{i}\omega t)C_\beta\alpha + \frac{1}{2}\mathrm{i}\omega' \exp(-\mathrm{i}\omega t/2)C_\alpha\beta$$

由上式，α、β的系数分别相等，可得

$$\dot{C}_\alpha = \frac{1}{2}\mathrm{i}\omega' \exp(\mathrm{i}qt)C_\beta \tag{4}$$

$$\dot{C}_\beta = \frac{1}{2}\mathrm{i}\omega' \exp(-\mathrm{i}qt)C_\alpha \tag{5}$$

式中，$q=\omega-\omega_{\mathrm{L}}$.

(3) 在式(4)、式(5)两式中消去C_α，$\dot{C}_\alpha$可得C_β的微分方程

$$\ddot{C}_\beta + \mathrm{i}q\dot{C}_\beta + \frac{1}{4}\omega'^2 C_\beta = 0$$

其两个特解为

$$C_\beta = \exp\left\{\mathrm{i}\left[-q \pm \sqrt{(q^2+\omega'^2)}\right]t/2\right\}$$

通解是

$$C_\beta = \exp(-\mathrm{i}qt/2)\left\{A\exp\left[\mathrm{i}\sqrt{q^2+\omega'^2}t/2\right] + B\exp\left[-\mathrm{i}\sqrt{q^2+\omega'^2}t/2\right]\right\} \tag{6}$$

式中，A、B是待定系数. 由初始条件，$t=0$时，$C_\alpha=1$，$C_\beta=0$，$\dot{C}_\beta=\frac{1}{2}\mathrm{i}\omega'$可求出$A$、$B$分别为

$$A=-B=\frac{\omega'}{2\sqrt{q^2+\omega'^2}} \tag{7}$$

将式(7)代入式(6)，最后可得

$$C_\beta = \frac{\mathrm{i}\omega'}{\sqrt{q^2+\omega'^2}}\exp(-\mathrm{i}qt/2)\sin\frac{\sqrt{q^2+\omega'^2}t}{2} \tag{8}$$

即

$$|C_\beta|^2 = \frac{\omega'^2}{q^2+\omega'^2}\sin^2\frac{\sqrt{q^2+\omega'^2}t}{2} \tag{9}$$

(4) 式(5)给出$\dot{C}_\beta$的严格方程，严格求解得到式(8)，在一阶微扰理论中式(5)中的C_α设为1，得出的解为

$$C_\beta = -\frac{\omega'}{2q}[\exp(-\mathrm{i}qt)-1]$$

由此得到

$$|C_\beta|^2 = \frac{\omega'^2}{q^2}\sin^2\frac{qt}{2} \tag{10}$$

比较式(9)与式(10)，我们看到倘若$q \gg \omega'$，则一阶微扰是个好的近似. 因为当$q \gg \omega'$时，$C_\beta \ll 1$，由于$C_\alpha^2 + C_\beta^2 = 1$所以$C_\alpha \approx 1$.

8.37　处于叠加态的谐振子在激光电磁场作用下的跃迁概率

题 8.37　(1) 假定某一角频率为 ω 的谐振子的态由波函数

$$\psi = N\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\psi_n(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\omega t},\quad \alpha = x_0\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi},\quad N=\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}$$

给出. 计算振子在该态中的平均位置 $\langle x\rangle$，并证明 $\langle x\rangle$ 的时间依赖关系是振幅为 x_0 相角为 ϕ 的经典振子. (2) 在一激光电磁场中一维谐振子 Hamilton 量为

$$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{ep}{2m\omega}E_0\sin\omega t-\frac{1}{2}eE_0x\cos\omega t+\frac{1}{2}m\omega_0^2x^2$$

其中 ω_0，m 和 e 是振子的角频率，质量和电荷，ω 是辐射的角频率. 假定激光在 $t=0$ 时加在处于基态 ψ_0 中的振子上. 将电磁相互作用视为微扰，在第一级下，求任意的 $t>0$ 时刻，振子处在激发态 ψ_n 上的概率.

有用的公式：归一化振子波函数 ψ_n 有以下性质

$$\left(x+\frac{\hbar}{m\omega}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\psi_n=\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}n\psi_{n-1}\left(x-\frac{\hbar}{m\omega}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\psi_n$$

$$=\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}(n+1)}\,\psi_{n+1}$$

解　(1) 易知 ψ 是归一的. 同时由题给公式可得

$$x|n\rangle=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{n}|n-1\rangle+\sqrt{n+1}|n+1\rangle)$$

所以

$$\langle x\rangle=\langle\psi|x|\psi\rangle=N^2\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^{*n}}{\sqrt{n!}}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{\alpha^k}{\sqrt{k!}}\cdot$$

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}n\omega t-\mathrm{i}k\omega t}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle n|\left(\sqrt{k}|k-1\rangle+\sqrt{k+1}|k+1\rangle\right)$$

$$=N^2\sum_{n=0}^{\infty}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left[\frac{\alpha^{*n}}{\sqrt{n!}}\cdot\frac{\alpha^{n+1}}{\sqrt{(n+1)!}}\sqrt{n+1}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}+\frac{\alpha^{*(n+1)}}{\sqrt{(n+1)!}}\cdot\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\sqrt{n+1}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\right]$$

$$=N^2\mathrm{e}^{|\alpha|^2}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\alpha\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}+\alpha^*\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t})$$

$$=x_0\cos(\phi-\omega t)$$

这正是振幅为 x_0，初相 ϕ 的经典振子.

(2) 初态 $\psi(t=0)=|0\rangle$

$$x|n\rangle=\sqrt{\hbar/2m\omega_0}\left(\sqrt{n}|n-1\rangle+\sqrt{n+1}|n+1\rangle\right)$$

$$p|n\rangle=i\sqrt{\frac{\hbar m\omega_0}{2}}\left(\sqrt{n+1}|n+1\rangle-\sqrt{n}|n-1\rangle\right)$$

所以

$$x|0\rangle=\sqrt{\hbar/2m\omega_0}\,|1\rangle$$

$$p|0\rangle=\mathrm{i}\sqrt{\hbar m\omega_0/2}\,|1\rangle$$

$$H'=\frac{ep}{2m\omega}E_0\sin\omega t-\frac{1}{2}eE_0x\cos\omega l$$

因此当$n\neq1$时，$H'_{n0}=0$．于是

$$P_{n0}=0,\qquad n>1$$

$$H'_{10}=\left\langle 1\left|\frac{ep}{2m\omega}E_0\sin\omega t-\frac{1}{2}eE_0x\cos\omega t\right|0\right\rangle$$

$$=\frac{eE_0}{2}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}\left(\mathrm{i}\frac{\omega_0}{\omega}\sin\omega t-\cos\omega t\right)$$

$$P_{10}=\frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t\frac{eE_0}{2}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}\left(\mathrm{i}\frac{\omega_0}{\omega}\sin\omega t'-\cos\omega t'\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0t'}\mathrm{d}t'\right|^2$$

$$=\frac{e^2E_0^2}{8m\omega_0\hbar}\left|\int_0^t\left[\frac{\omega_0}{2\omega}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t'}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t'})-\frac{1}{2}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t'}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t'}\right)\right]\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0t'}\mathrm{d}t'\right|^2$$

$$=\frac{e^2E_0^2}{8m\omega_0\hbar}\left[\frac{1}{2\omega^2}+\frac{8\omega_0^2}{(\omega_0^2-\omega^2)^2}-\frac{1}{2\omega^2}\cos2\omega t\right]$$

$$+\frac{e^2E_0^2}{4m\omega\hbar}\left[\frac{\cos(\omega_0+\omega)t}{(\omega_0+\omega)^2}-\frac{\cos(\omega_0-\omega)t}{(\omega_0-\omega)^2}\right]$$

8.38　处于 2s 与 2p 叠加态

题 8.38　假设存在小的宇称破坏力，则氢原子$2^2\mathrm{s}_{1/2}$态混入了少量的 p 波

$$\psi\left(n=2,j=\frac{1}{2}\right)=\psi_{\mathrm{s}}\left(n=2,j=\frac{1}{2},l=0\right)+\varepsilon\psi_{\mathrm{p}}\left(n=2,j=\frac{1}{2},l=1\right)$$

一级辐射衰变下此态退激成什么态？求出衰变矩阵元．当$\varepsilon\to0$时怎样？为什么？

解　一级辐射是电偶极辐射，它使该态退激成$\psi\left(n=1,\ j=\frac{1}{2}\right)$态，后者是$m_j=\pm\frac{1}{2}$态的两重简并态．

辐射矩阵元为

$$H'_{12}=\left\langle\psi\left(n=1,j=\frac{1}{2}\right)\right|-er\left|\psi\left(n=2,j=\frac{1}{2}\right)\right\rangle$$

$$=\varepsilon\left\langle\psi\left(n=1,j=\frac{1}{2}\right)\right|-er\left|\psi_{\mathrm{p}}\left(n=2,j=\frac{1}{2},l=1\right)\right\rangle$$

将有关的耦合表象基矢用非耦合表象基矢表达

$$\psi\left(n=1, j=\frac{1}{2}, m_j=\frac{1}{2}\right)=|100\rangle\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

$$\psi\left(n=1, j=\frac{1}{2}, m_j=-\frac{1}{2}\right)=|100\rangle\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

$$\psi_{\mathrm{p}}\left(n=2, j=\frac{1}{2}, l=1, m_j=\frac{1}{2}\right)=-\sqrt{\frac{1}{3}}|210\rangle\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+\sqrt{\frac{2}{3}}|211\rangle\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

$$\psi_{\mathrm{p}}\left(n=2, j=\frac{1}{2}, l=1, m_j=-\frac{1}{2}\right)=-\sqrt{\frac{2}{3}}|21-1\rangle\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+\sqrt{\frac{1}{3}}|210\rangle\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

于是，有关的矩阵元为

$$H_{12}'=\varepsilon\left\langle\psi\left(n=1, j=m_j=\frac{1}{2}\right)\right|-e\boldsymbol{r}\left|\psi_{\mathrm{p}}\left(m_j=\frac{1}{2}\right)\right\rangle$$

$$=\sqrt{\frac{1}{3}}e\varepsilon\langle 100|\boldsymbol{r}|210\rangle=\sqrt{\frac{1}{3}}e\varepsilon\langle 100|z|210\rangle\boldsymbol{e}_z$$

$$=\frac{e\varepsilon}{3}\langle 100|r|210\rangle\boldsymbol{e}_z=\frac{e\varepsilon A}{3}\boldsymbol{e}_z$$

式中，$A=\langle 100|r|200\rangle$，$\boldsymbol{e}_z$ 为 z 方向单位矢量.

$$H_{12}'=\varepsilon\left\langle\psi\left(n=1, j=\frac{1}{2}, m_j=-\frac{1}{2}\right)\right|-er\left|\psi_{\mathrm{p}}\left(m=\frac{1}{2}\right)\right\rangle=-\sqrt{\frac{2}{3}}e\varepsilon\langle 100|r|211\rangle$$

$$=-\sqrt{\frac{2}{3}}e\varepsilon\langle 100|xe_x+ye_y|211\rangle=-\frac{e\varepsilon A}{3}(e_x+\mathrm{i}e_y).$$

$$H_{12}'=\varepsilon\left\langle\psi\left(n=1, j=m_j=\frac{1}{2}\right)\right|-e\boldsymbol{r}\left|\psi_{\mathrm{p}}\left(m_j=-\frac{1}{2}\right)\right\rangle=-\frac{e\varepsilon A}{3}(\boldsymbol{e}_x-\mathrm{i}\boldsymbol{e}_y).$$

$$H_{12}'=\varepsilon\left\langle\psi\left(n=1, j=\frac{1}{2}, m_j=-\frac{1}{2}\right)\right|-e\boldsymbol{r}\left|\psi_{\mathrm{p}}\left(m_j=-\frac{1}{2}\right)\right\rangle=-\sqrt{\frac{1}{3}}e\varepsilon\langle 100|\boldsymbol{r}|210\rangle$$

$$=\frac{e\varepsilon A}{3}\boldsymbol{e}_z$$

可以看到，若 $2^2\mathrm{s}_{1/2}$ 态宇称有 ε 的破坏，则由电偶极辐射可以形成向基态 $1^2\mathrm{s}_{1/2}$ 的跃迁(退激)，这种退激跃迁的概率 $\propto\varepsilon^2$. 当 $\varepsilon\to 0$ 时，电偶极辐射不能使 $\psi_{\mathrm{s}}\left(n=2,\ j=\frac{1}{2},\ l=0\right)$ 态退激到 $\psi_{\mathrm{s}}\left(n=1,\ j=\frac{1}{2},\ l=0\right)$ 态，因为电偶极辐射扰动 H' 是极矢量，只有 $\Delta l=\pm1$ 的跃

迁的矩阵元才不为零.

8.39 氢原子 $1s^3S_1$ 与 $1s^1S_0$ 态之间的超精细分裂及辐射跃迁矩阵元

题 8.39 (1) 描述氢原子中电子质子间超精细相互作用部分的 Hamilton 量为

$$H' = -\frac{8\pi}{3}\boldsymbol{\mu}_e \cdot \boldsymbol{\mu}_{\mathrm{p}}\delta^3(\boldsymbol{r}).$$

式中，$\boldsymbol{\mu}_i = (e_i g_i / 2m_i c)\boldsymbol{S}_i$ 是粒子 i 的磁矩，且 $\boldsymbol{S}_i = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_i$ 为粒子 i 的自旋($\boldsymbol{\sigma}$ 是 Pauli 矩阵). 计算氢原子 $1s^3S_1$ 态与 $1s^1S_0$ 态之间的超精细分裂. 哪个态能量较低? 物理上的解释为什么. (2) $1s^3S_1$ 态和 $1s^1S_0$ 态之间跃迁产生的辐射场的矢势当 $r \to \infty$ 有一般形式

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) = \left[-\mathrm{i}\frac{\omega}{c}\langle \boldsymbol{x}\rangle + \mathrm{i}\frac{\omega}{c}\hat{n}\times\frac{e}{2m_e c}\langle \boldsymbol{L}\rangle + \mathrm{i}\frac{\omega e}{2m_e c^2}\hat{n}\times\langle \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{e}}\rangle + \cdots \frac{1}{r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\omega}{c}r - \mathrm{i}\omega t}\right]$$

式中，$\hat{n}$ 是沿辐射传播方向的单位矢量，$\langle\ \rangle$ 为这个跃迁的矩阵元. 明确地证明上式中三个矩阵元是否不为零. 跃迁中产生的辐射特性是什么?

解 设 1s 态的空间波函数是 $\psi_0(\boldsymbol{r})$. 自旋单态 χ_{00}，自旋三态 $\chi_{1M}\,(M = 0, \pm 1)$.

(1) 此问题是简并微扰，微扰 Hamilton 量为

$$\begin{aligned} H' &= \frac{2\pi}{3}\cdot\frac{e^2 g_e g_{\mathrm{p}}}{m_e m_{\mathrm{p}} c^2}\boldsymbol{S}_e \cdot \boldsymbol{S}_{\mathrm{p}}\delta^3(\boldsymbol{r}) \\ &= \frac{A}{2}\left[(\boldsymbol{S}_e + \boldsymbol{S}_{\mathrm{p}})^2 - \boldsymbol{S}_e^2 - \boldsymbol{S}_{\mathrm{p}}^2\right]\delta^3(\boldsymbol{r}) \\ &= \frac{A}{2}\left(\boldsymbol{S}^2 - \frac{3}{2}\hbar^2\right)\delta^3(\boldsymbol{r}) \end{aligned}$$

式中，$A \approx \frac{2\pi}{3}\frac{e^2 g_e g_{\mathrm{p}}}{m_e m_{\mathrm{p}} c^2}$，取 $\psi_0(\boldsymbol{r})\chi_{00}$，$\psi_0(\boldsymbol{r})\chi_{1M}$ 为基矢，易知 H' 在此基中是对角矩阵.

对 $1s^1S_0$ 能级

$$\Delta E_1 = \langle \psi_0\chi_{00}|H'|\psi_0\chi_{00}\rangle = -\frac{3}{4}A\hbar^2|\psi_0(\boldsymbol{r}=0)|^2$$

对 $1s^3S_1$ 能级

$$\Delta E_2 = \langle \psi_0\chi_{1M}|H'|\psi_0\chi_{1M}\rangle = \frac{1}{4}A\hbar^2|\psi_0(r=0)|^2$$

$$\psi_0(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\frac{2}{a^{3/2}}\mathrm{e}^{-r/a}, \qquad |\psi_0(r=0)|^2 = \frac{1}{\pi a^3}$$

超精细分裂为

$$\Delta E = \Delta E_2 - \Delta E_1 = \frac{1}{\pi a^3}A\hbar^2$$

从以上计算结果可知，单态($^1S_0$)能量低.

物理意义如下：质子与电子间有自旋磁偶极矩相互作用，因磁偶极矩产生的磁场随距

离变化下降很快，所以只考虑电子与质子靠得很近时的磁作用. 当 $\boldsymbol{\mu}_e$ 与 $\boldsymbol{\mu}_\mathrm{p}$ 同向时. 电子与质子间磁作用的能量最低(注意 $E=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}$)而反平行时. 能量最高. $\boldsymbol{\mu}_e$ 与 $\boldsymbol{\mu}_\mathrm{p}$ 同向则 $\boldsymbol{S}_e$ 与 $\boldsymbol{S}_\mathrm{p}$ 反向，所以单态能量低.

(2) 三态向单态跃迁. 由于含 x 项和 L 项不含自旋算符，可知

$$\langle x\rangle=\langle\psi_0\chi_{00}|x|\psi_0\chi_{1M}\rangle=\langle\psi_0|x|\psi_0\rangle\langle\chi_{00}|\chi_{1M}\rangle=0$$

$$\langle L\rangle=\langle\psi_0\chi_{00}|L|\psi_0\chi_{1M}\rangle=0$$

$$\langle\sigma_e\rangle=\langle\psi_0\chi_{00}|\sigma_e|\psi_0\chi_{1M}\rangle=\langle\chi_{00}|\sigma_e|\chi_{1M}\rangle$$

我们取

$$\chi_{00}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_e\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_\mathrm{p}-\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_\mathrm{p}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_e\right]$$

$$\chi_{11}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_e\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_\mathrm{p}$$

$$\chi_{10}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_e\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_\mathrm{p}+\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_\mathrm{p}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_e\right]$$

$$\chi_{1-1}=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_e\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_\mathrm{p}$$

$$\langle\chi_{00}|\sigma_e|\chi_{11}\rangle=-\frac{1}{\sqrt{2}}(0,\ 1)\sigma_e\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=-\frac{1}{\sqrt{2}}e_x-\frac{1}{\sqrt{2}}e_y$$

$$\langle\chi_{00}|\sigma_e|\chi_{1-1}\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(1,\ 0)\sigma_e\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}e_x-\frac{1}{\sqrt{2}}e_y$$

$$\langle\chi_{00}|\sigma_e|\chi_{10}\rangle=\frac{1}{2}(1,\ 0)\sigma_e\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}-\frac{1}{2}(0,\ 1)\sigma_e\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=e_z$$

所以

$$\langle\sigma_\mathrm{e}\rangle\neq0$$

这里 $\boldsymbol{e}_x$ 、 $\boldsymbol{e}_y$ 、 $\boldsymbol{e}_z$ 分别为 x 、 y 、 z 轴方向单位矢量.

辐射特性：注意到 $\boldsymbol{A}$ 的方向是 $\boldsymbol{n}\times\langle\sigma_\mathrm{e}\rangle$ ，这类似于磁偶极辐射的矢势，所以可以认为 $1\mathrm{s}^3S_1$ 到 $1\mathrm{s}^1S_0$ 的跃迁辐射是磁偶极辐射.

8.40 在磁场 $B_x = B_0 \cos\omega t, B_y = B_0 \sin\omega t, B_z =$ 常数 $(B_0 \ll B_z)$ 作用下自旋态的跃迁

题 8.40 质子磁矩为 μ，在磁场 $B_x = B_0 \cos\omega t, B_y = B_0 \sin\omega t, B_z =$ 常数 $(B_0 \ll B_z)$ 中运动. 在 $t=0$ 时，所有质子都在 z 方向极化. (1) ω 为何值时发生共振跃迁? (2) 在时刻 t，质子自旋在 $-z$ 方向的概率有多大?

解 (1) 将 $\boldsymbol{B}' = B_x \boldsymbol{e}_x + B_y \boldsymbol{e}_y$ 看成微扰，$H_0 = -\mu B_x \sigma_z$，自旋沿 $+z$ 和 $-z$ 的两个能级之差为 $2\mu B_z$，所以当 $\omega = 2\mu B_z / \hbar$ 时发生共振跃迁.

(2) Schrödinger 方程为 $(H = -\mu \cdot \boldsymbol{B})$

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = -\mu \begin{pmatrix} B_z & B_0 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \\ B_0 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega} & -B_z \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

式中，a 和 b 分别为电子处于自旋向上 $(+z)$ 和自旋向下(沿 $-z$)状态中的概率幅. 设

$$a = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\omega}{2}t} f, \qquad b = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\omega}{2}t} g$$

得到 f 和 g 满足的方程

$$\hbar \frac{\omega}{2} f + \mathrm{i}\hbar \frac{\partial f}{\partial t} + \mu B_z f + \mu B_0 g = 0$$

$$\mu B_0 f + \mathrm{i}\hbar \frac{\partial g}{\partial t} - \hbar \frac{\omega}{2} g - \mu B_z g = 0$$

考虑到初始条件 $t=0$ 时，$|f|=1$，$g=0$，得

$$f = -\frac{1}{\hbar\Omega}\left(\hbar\frac{\omega}{2} + \mu B_z\right)\sin\Omega t + \mathrm{i}\cos\Omega t$$

$$g = \frac{-\mu B_0}{\hbar\Omega}\sin\Omega t$$

式中，$\Omega = \frac{1}{\hbar}\sqrt{\left(\hbar\frac{\omega}{2} + \mu B_z\right)^2 + \mu^2 B_0^2}$. 所以在时刻 t，质子自旋在 $-z$ 方向的概率为

$$P = |b|^2 = |g|^2 = \left(\frac{\mu B_0}{\hbar\Omega}\right)^2 \sin^2 \Omega t$$

8.41 关于核磁共振的一些问题

题 8.41 一片石蜡放在一均匀磁场 H_0 中. 石蜡中含许多氢原子核. 这些原子核的自旋与其周围环境彼此无相互作用，并且在一级近似下只与外磁场相互作用. (1) 在温度为 T 时，写出处于各种磁亚稳态中质子数目的表达式. (2) 为了能够观察到由于振荡磁场而

引起的共振吸收，引入一电频线圈. 振荡磁场相对于磁场 H_0 应沿何方向？为什么？(3) 频率为多少时才能观察到共振吸收？在你的表达式中给出每一个量的单位使得频率以兆周为单位. (4) 用质子自旋态发生跃迁的机制说明为什么在初始脉冲之后从磁场中吸收能量的现象仍然不消失，而实际上却是以一定的速率在连续进行着. 当振荡磁场的强度增到很强时，吸收率如何改变？为什么？

解　(1) 每个氢原子核的自旋与外磁场作用的 Hamilton 量为

$$H = -\boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{H}_0 = -g\mu_N S_z H_0 = -g\mu_N H_0 S_z$$

所以有两个状态：$\left|S_z = \frac{1}{2}\right\rangle$ 及 $\left|S_z = -\frac{1}{2}\right\rangle$. 能量分别为

$$E_{1/2} = -\frac{1}{2} g\mu_N H_0, \qquad E_{-1/2} = \frac{1}{2} g\mu_N H_0$$

式中，g 为 P 的 Landau 因子，μ_N 是质子磁矩，$\mu_N = e\hbar / 2M_p c$.

由统计平衡条件，在温度为 T 时处于各态的概率为

$$\left|S_z = \frac{1}{2}\right\rangle: \quad \frac{\exp\left(\frac{1}{2} g\mu_N H_0 / KT\right)}{\exp\left(\frac{1}{2} g\mu_N H_0 / KT\right) + \exp\left(-\frac{1}{2} g\mu_N H_0 / KT\right)}$$

$$\left|S_z = -\frac{1}{2}\right\rangle: \quad \frac{\exp\left(-\frac{1}{2} g\mu_N H_0 / KT\right)}{\exp\left(\frac{1}{2} g\mu_N H_0 / KT\right) + \exp\left(-\frac{1}{2} g\mu_N H_0 / KT\right)}$$

这也是数目的百分比.

(2) 振荡磁场 H' 的方向应与 $\boldsymbol{H}_0$ 垂直. 因为这时的 Hamilton 量(只对核的自旋态而言)为

$$H = -\mu H_0 S_z - \mu(H' \cos \omega t S_x + H' \sin \omega t S_y)$$

这时的跃迁矩阵元 $\left\langle S_z = \frac{1}{2}\right| H \left| S_z = -\frac{1}{2}\right\rangle$ 及 $\left\langle S_z = -\frac{1}{2}\right| H \left| S_z = \frac{1}{2}\right\rangle$ 不为零. 这样方才可能发生自旋态间的跃迁.

(3) 振荡频率应满足如下关系才可能发生吸收

$$\hbar\omega_i = E_{-1/2} - E_{1/2}$$

即

$$\omega_i = \frac{g\mu_N H_0}{\hbar}$$

式中，$g = 5.6$，$\mu_N = 4.8 \times 10^{-10} \frac{\hbar}{2} \times 1.7 \times 10^{-24} \times 3 \times 10^{10}$.

(4) 由于质子与质子之间自旋态的相互作用趋于保持其热平衡分布. 这样即便在外场消失之后，每个质子仍受其周围质子产生的磁场的作用，从而可以继续产生自旋态的跃迁.

当场很强时，吸收率达到一饱和值.

8.42　在势 $V=\begin{cases}-\dfrac{\beta}{x}, & x>0\\ \infty, & x<0\end{cases}$ 中的束缚态电子对平面光波的吸收截面

题 8.42　电子被下面的势束缚在基态

$$V=\begin{cases}-\dfrac{\beta}{x}, & x>0\\ \infty, & x<0\end{cases}$$

势与 y,z 无关. 求方向 $\hat{k}$，极化矢量 $\boldsymbol{\varepsilon}$，能量 $\hbar\omega$ 平面光波的吸收截面. 说明电子的末态. 设

$$\frac{\beta^2 m}{\hbar^2}\ll\hbar\omega\ll mc^2$$

解　从势的表达可式知，电子在初态时在 y、z 方向是自由运动的，所以电子初态为

$$\begin{cases}\psi_i(r)=\varphi(x)\exp\left(\dfrac{\mathrm{i}(p_y y+p_z z)}{\hbar}\right)\\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}x^2}-\dfrac{\beta}{x}\varphi=E\varphi, & x>0\\ \varphi=0, & x<0\end{cases}$$

φ 的方程与氢原子 $l=0$ 的径向方程相同. 故

$$E_n=-\frac{m\beta^2}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}$$

于是 x 方向的基态(初始)为

$$\begin{cases}E_1=-\dfrac{m\beta^2}{2\hbar^2}\\ \varphi_1(x)=\dfrac{2x}{a^{3/2}}\mathrm{e}^{-x/a}, \quad x>0, \quad a=\dfrac{\hbar^2}{m\beta}\end{cases}$$

由此知，题设的条件可改写为

$$\frac{\beta}{\alpha}\ll\hbar\omega\ll mc^2$$

即光量子能量远大于 x 方向的平均束缚势能，可释放电子；但它却远小于电子的静止能量，不能产生电子对，是非相对论的.

这样，电子的初态为

$$\psi_i(r)=\langle r|i\rangle=C\varphi_1(x)\exp\left[\mathrm{i}\left(k_y^{(i)}y+k_z^{(i)}z\right)\right]$$

式中，$k_y^{(i)}=p_y/\hbar$，$k_z^{(i)}=p_z/\hbar$ 是原始电子在 y，z 方向的波数. $C=\left(\frac{1}{\sqrt{L}}\right)^2=\frac{1}{L}$，是将初态电子在 yz 面的平面盒子中归一到一个电子(为了下面计算截面的需要).

电子的末态是 $\boldsymbol{k}_j^{(f)}$ (观察方向)方向的自由电子，可写为

$$\psi_f(\boldsymbol{r})=\langle \boldsymbol{r}|f\rangle=\frac{1}{\sqrt{V}}\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}_j^{(f)}\cdot\boldsymbol{r})$$

此处 $V=L^3$，是箱归一化的. 以上是第一步.

第二步，给出微扰 Hamilton 量 H' 和入射光子流强.

微扰 Hamilton 量 H' 为

$$H'=H-H_0=\left[\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{P}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+V\right]-\left(\frac{1}{2m}\boldsymbol{P}^2+V\right)\approx\frac{|e|}{mc}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{P}$$

这里，已用了辐射规范 $\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0$ 并略去了含 A^2 的项. 下面书写中略去电子电荷 e 的绝对值符号，即 $e>0$. 于是，当取电场($\boldsymbol{\varepsilon}=\{\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_z\}$ 是 $\boldsymbol{E}$ 的单位方向矢量)

$$\boldsymbol{E}=E\boldsymbol{\varepsilon}\sin(\omega t-\boldsymbol{k}_i^{(r)}\cdot\boldsymbol{r}+\delta_0)$$

时，则势 $\boldsymbol{A}$ 为

$$\boldsymbol{A}=\frac{E}{\omega}\boldsymbol{\varepsilon}\cos(\omega t-\boldsymbol{k}_i^{(r)}\boldsymbol{r}+\delta_0)$$

而

$$H'=\frac{-\mathrm{i}\hbar e}{2m\omega}\left\{\exp\left[\mathrm{i}(\omega t-\boldsymbol{k}_i^{(r)}\cdot\boldsymbol{r}+\delta_0)\right]+\exp\left[-\mathrm{i}(\omega t-\boldsymbol{k}_i^{(r)}\cdot\boldsymbol{r}+\delta_0)\right]\right\}E\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\nabla$$

由于这里只研究光子吸收问题，$E_f>E_i$，由周期微扰理论知只有此处第二项才有贡献(第一项是光辐射).

于是，我们得到本题所用的微扰 Hamilton 量

$$H'=\frac{-\mathrm{i}\hbar e}{2m\omega}\exp\left[-\mathrm{i}(\omega t-\boldsymbol{k}_i^{(r)}\cdot\boldsymbol{r}+\delta_0)\right]E\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\nabla$$

式中，$\boldsymbol{k}_i^{(r)}$ 是入射光子的波矢，由于题目中未规定其方向. 我们虽可选 yz 轴使之稍为简化，但好处不大. 故下面计算中仍对 $\boldsymbol{k}_f^{(e)}$，$\boldsymbol{k}_i^{(r)}$，$\boldsymbol{E}$(它垂直于 $\boldsymbol{k}_i^{(r)}$)的方向不作选择.

由 $\boldsymbol{E}=-\frac{1}{c}\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}$，$\boldsymbol{H}=\nabla\times\boldsymbol{A}$，$\boldsymbol{S}=\frac{c}{4\pi}(\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{H})$ 等公式，得 Poynting 矢量 $\boldsymbol{S}$ 为

$$\boldsymbol{S}=\frac{c^2}{4\pi\omega}E^2\boldsymbol{k}_i^{(r)}$$

对时间平均得

$$\overline{S}=\frac{cE^2}{8\pi}$$

于是，入射光子流强(单位时间内入射到与 $\boldsymbol{k}_i^{(r)}$ 相垂直的单位截面上的光子数)为

$$n=\frac{\overline{S}}{\hbar\omega}=\frac{cE^2}{8\pi\hbar\omega}$$

下面求吸收截面时，将以此去归一.

第三步，给出光电效应的微分吸收截面

$$\frac{d\sigma}{dQ_f}=\frac{\omega_{i\to f}^{\text{group}}}{n}$$

这里，$\omega_{i\to f}^{\text{group}}$是单位时间内，向$E_f$处$f$态附近单位立体角(由态密度决定)内，跃迁入末态的电子数. 根据一级微扰论的黄金规则

$$\omega_{i\to f}^{group}d\Omega_f=\frac{2\pi}{\hbar}\rho(E_f)\left|W_{fi}\right|^2 d\Omega_f$$

式中，$\rho(E_f)$为单位能间隔、单位立体角内末态电子的态密度，对非相对论情况，$\rho=\frac{Vmk_f}{8\pi^3\hbar^2}=\frac{mk_fL^3}{8\pi^3\hbar^2}$. k_f为末态电子波数.

$$W_{fi}=\left\langle f\left|\frac{-i\hbar e}{2m\omega}\exp\left[-i\left(-\boldsymbol{k}_i^{(r)}\cdot\boldsymbol{r}+\delta_0\right)\right]E\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\nabla\right|i\right\rangle$$

$$=\frac{-i\hbar e}{2m\omega}e^{-i\delta_0}\int_0^{+\infty}dx\iint_{-\infty}^{+\infty}dydz\frac{1}{\sqrt{V}}\exp\left[-i\boldsymbol{k}_f^{(e)}\cdot\boldsymbol{r}+i\boldsymbol{k}_i^{(r)}\cdot\boldsymbol{r}\right]$$

$$\cdot(E\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\nabla)C\varphi_1(x)\exp\left[i\left(k_y^{(e)}y+k_z^{(e)}z\right)\right]$$

$$=\frac{-i\hbar CEe^{-i\delta_0}}{2m\omega\sqrt{V}}\int dxdydz\left\{\varepsilon_x\left(\frac{1}{x}-\frac{1}{a}\right)+i\varepsilon_yk_y^{(e)}+i\varepsilon_zk_z^{(e)}\right\}$$

$$\cdot\varphi_1(x)\exp\left[-i\boldsymbol{k}_f^{(e)}\cdot\boldsymbol{r}+i\boldsymbol{k}_i^{(r)}\cdot\boldsymbol{r}\right]\exp\left[i(k_y^{(e)}y+k_z^{(e)}z)\right]$$

$$=\frac{4\pi^2\sqrt{a}\hbar Ee^{-i\delta_0}}{m\omega L^{5/2}[1+ia(k_x^{(f)}-k_x^{(i)})]^2}\left\{\varepsilon_x(k_x^{(f)}-k_x^{(i)})\right.$$

$$\left.-\varepsilon_yk_y^{(e)}-\varepsilon_zk_z^{(e)}\right\}\delta(-k_y^{(f)}+k_y^{(i)}+k_y^{(e)})\delta(-k_z^{(f)}+k_z^{(i)}+k_z^{(e)})$$

于是微分吸收截面为

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_f}=\frac{8\pi ak_fe^2}{m\omega c(1+a^2\Delta^2)^2}\left[\varepsilon_x\Delta-\varepsilon_yk_y^{(e)}-\varepsilon_zk_z^{(e)}\right]^2$$

$$\cdot\delta(k_y^{(i)}+k_y^{(e)}-k_y^{(f)})\delta(k_z^{(i)}+k_z^{(e)}-k_z^{(f)})$$

在上面计算中，已改写记号$\boldsymbol{k}_f^{(e)}\to\boldsymbol{k}^{(f)}=\{k_x^{(f)},\ k_y^{(f)},\ k_z^{(f)}\}$，$\boldsymbol{k}_i^{(r)}\to\boldsymbol{k}^{(i)}=\{k_x^{(i)},\ k_y^{(i)},\ k_z^{(i)}\}$；并且注意到

$$\left[\delta(k_y^{(i)}+k_y^{(e)}-k_y^{(f)})\right]^2$$

$$=\frac{1}{2\pi}\int_{-L/2}^{L/2}\delta(k_y^{(i)}+k_y^{(e)}-k_y^{(f)})\exp[iy(k_y^{(i)}+k_y^{(e)}-k_y^{(f)})]dy$$

$$=\frac{L}{2\pi}\delta(k_y^{(i)}+k_y^{(e)}-k_y^{(f)})$$

同理

$$\left[\delta(k_z^{(i)}+k_z^{(e)}-k_z^{(f)})\right]^2=\frac{L}{2\pi}\delta(k_z^{(i)}+k_z^{(e)}-k_z^{(f)})$$

这两个 δ 函数代表在 y，z 方向的动量分量守恒.) $\Delta \equiv k_x^{(f)} - k_x^{(i)}$.

根据过程的能量守恒，我们有

$$\frac{\hbar^2 k_f^2}{2m} = E_1 + \frac{\hbar^2 (k_y^{(e)^2} + k_z^{(e)^2})}{2m} + \hbar\omega = -|E_1| + \frac{\hbar^2 (k_y^{(e)^2} + k_z^{(e)^2})}{2m} + \hbar\omega$$

由于 $\boldsymbol{k}_f$ 的 y，z 分量已按上面 δ 函数要求为确定值，故由此方程即知 $\boldsymbol{k}_f$ 的 x 分量也是确定的. 在此微分吸收截面中，出现 δ 函数是由于在 y，z 方向初始电子具有确定的动量，和入射光子(动量也是确定的)碰撞，按能量、动量守恒，其末态电子的散射方向是确定的.

最后一步，求对此种入射光子的总吸收截面. 注意到 $\delta(\alpha x) = \frac{1}{\alpha}\delta(x)$，于是

$$\begin{cases} \delta(k_y^{(f)} - k_y^{(i)} - k_y^{(e)}) = \dfrac{1}{k_f}\delta\left(\sin\theta_f \sin\varphi_f - \dfrac{k_y^{(i)} + k_y^{(e)}}{k_f}\right) \\ \delta(k_z^{(f)} - k_z^{(i)} - k_z^{(e)}) = \dfrac{1}{k_f}\delta\left(\cos\theta_f - \dfrac{k_z^{(i)} + k_z^{(e)}}{k_f}\right) \end{cases}$$

总吸收截面为

$$\sigma_a = \int \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega_f}\mathrm{d}\Omega_f = \frac{8\pi a e^2 k_f}{m\omega c}\int \frac{1}{k_f^2}\left[\frac{\varepsilon_x(k_f \sin\theta_f \cos\varphi_f - k_x^{(i)} - \varepsilon_y k_y^{(e)} - \varepsilon_z k_z^{(e)})}{1 + a^2(k_f \sin\theta_f \cos\varphi_f - k_x^{(i)})^2}\right]^2$$

$$\cdot\delta\left(\sin\theta_f \sin\varphi_f - \frac{k_y^{(i)} + k_y^{(e)}}{k_f}\right)\delta\left(\cos\theta_f - \frac{k_z^{(i)} + k_z^{(e)}}{k_f}\right)\sin\theta_f \mathrm{d}\theta_f \mathrm{d}\varphi_f$$

注意到对 θ_f 的积分可写为 $\mathrm{d}\cos\theta_f$，即可消去第二个 δ 函数. 故

$$\sigma_a = \frac{8\pi a e^2}{m\omega c k_f}\int_0^{2\pi}\left[\frac{\varepsilon_x(k_f \sin\theta_f \cos\varphi_f - k_x^{(i)} - \varepsilon_y k_y^{(e)} - \varepsilon_z k_z^{(e)})}{1 + a^2(k_f \sin\theta_f \cos\varphi_f - k_x^{(i)})^2}\right]^2 \frac{\delta\left(\sin\varphi_f - \dfrac{k_y^{(i)} + k_y^{(e)}}{k_f \sin\theta_f}\right)\dfrac{\mathrm{d}(\sin\varphi_f)}{\cos\varphi_f}}{\sin\theta_f}$$

$$= \frac{8\pi a e^2}{m\omega c k_f}\left[\frac{\varepsilon_x(k_f \sin\theta_f \cos\varphi_f - k_x^{(i)}) - \varepsilon_y k_y^{(e)} - \varepsilon_z k_z^{(e)}}{1 + a^2(k_f \sin\theta_f \cos\varphi_f - k_x^{(i)})^2}\right]^2$$

8.43　同一 Hamilton 量下引起的跃迁概率 $P_{k\to j}(t) = P_{j\to k}(t)$

题 8.43　设 $P_{k\to j}(t)$ 为一个依赖时间变化的 Hamilton 量 $H^{(1)}(t')$ 引起的从 $t' = 0$ 时的 k 态到 $t' = t$ 时刻的 j 态的跃迁概率，用一阶含时微扰论证明 $P_{k\to j}(t) = P_{j\to k}(t)$，这里 $P_{j\to k}(t)$ 是同一 Hamilton 量引起的从 $t' = 0$ 时的 j 态到 $t' = t$ 时的 k 态的跃迁概率.

解　由一阶含时微扰论可知

$$P_{k\to j}(t) = |C_{k\to j}(t)|^2$$

式中

$$C_{k\to j}(t)=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^t\left\langle j\middle|H^{(1)}(t')\middle|k\right\rangle\exp(\mathrm{i}\omega_{jk}t')\mathrm{d}t'$$

相反的跃迁系数由与上式类似的积分给出，

$$C_{j\to k}(t)=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^t\left\langle k\middle|H^{(1)}(t')\middle|j\right\rangle\exp(\mathrm{i}\omega_{kj}t')\mathrm{d}t' \tag{1}$$

由于 $H^{(1)}(t')$ 是 Hermite 的，所以有

$$\left\langle k\middle|H^{(1)}(t')\middle|j\right\rangle=\left\langle j\middle|H^{(1)}(t')\middle|k\right\rangle^* \tag{2}$$

还有

$$\hbar\omega_{kj}=E_k-E_j=-\hbar\omega_{jk} \tag{3}$$

将式(2)、(3)代入式(1)，发现

$$C_{j\to k}(t)=-\left[C_{k\to j}(t)\right]^*$$

即导致

$$P_{j\to k}(t)=\left|C_{j\to k}(t)\right|^2=P_{k\to j}(t)$$

讨论 上面结果虽然是用一阶含时微扰论导出来，但它适合于一般情况. 由同一个外界激励 $H^{(1)}(t)$ 引起的两个态之间的相互跃迁概率相同，这被称为细致平衡原理.

8.44 一恒温盒中一组仅有两个非简并态的全同原子

题 8.44 一组全同原子，它们有两个态 k 和 j，分别有不简并的能级 E_k 和 $E_j(E_k>E_j)$，当它们处于一个壁的温度不随时间改变的盒子中，通过考虑原子在两个态的平衡数量证明

$$\frac{A}{B}=\frac{\hbar\omega_{kj}^3}{\pi^2c^3}$$

这里 A 和 B 是 Einstein 自发辐射系数和受激辐射系数，而 $\hbar\omega_{kj}=E_k-E_j$.

解 设盒子的壁的温度为 T，在 k 和 j 态的原子数分别为 N_k 和 N_j. 令能量度度函数 $I(\omega_{kj})=I$.

由自发辐射系数 A 和受激辐射系数 B 的定义可知，A 是单位时间内由 $k\to j$ 的自发跃迁的概率，BI 是由 $k\to j$ 的受激跃迁速率. 所以单位时间内由 $k\to j$ 态的总跃迁原子数为

$$n_{k\to j}=(A+BI)N_k$$

因为只有受激跃迁能够发生在由 $j\to k$ 的方向，所以单位时间内由 $j\to k$ 的跃迁原子数为

$$n_{j\to k}=BIN_j$$

这里 B 等于吸收系数.

注意到上题的结果(细致平衡原理)，在平衡时

$$n_{k\to j}=n_{j\to k}$$

即

$$\frac{N_j}{N_k}=\frac{A}{BI}+1 \tag{1}$$

在热平衡时 $\frac{N_j}{N_k}$ 满足 Boltzmann 分布，这样有

$$\frac{N_j}{N_k}=\frac{\exp(-E_j/k_BT)}{\exp(-E_k/k_BT)}=\exp(\hbar\omega_{kj}/k_BT) \tag{2}$$

由式(1)和式(2)可得

$$\frac{A}{BI(\omega_{kj})}=\exp(\hbar\omega_{kj}/k_BT)-1$$

最后，由 Planck 给出的关于黑体辐射的 $I(\omega_{kj})$ 公式

$$I(\omega_{kj})=\frac{\hbar\omega_{kj}^3}{\pi^2c^3}\cdot\frac{1}{\exp(\hbar\omega_{kj}/k_BT)-1}$$

可得

$$\frac{A}{B}=\frac{\hbar\omega_{kj}^3}{\pi^2c^3}$$

8.45　氢原子通过电偶极辐射到基态，辐射的相对频率宽度数量级

题 8.45　设 Einstein 自发辐射系数 $A=\frac{4}{3}\cdot\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{\hbar c^3}\omega_{kj}^3\left|\langle j|\boldsymbol{r}|k\rangle\right|^2$，证明：一个原子通过电偶极辐射到氢原子基态，辐射的相对频率宽度具有 α^3 的数量级，这里 $\alpha=e^2/4\pi\varepsilon_0 c\hbar$ 是精细结构常数.

解　在电偶极近似中，自发辐射系数 A 给出单位时间由 k 态到 j 态自发跃迁概率，即

$$A=\frac{4}{3}\cdot\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{\hbar c^3}\omega_{kj}^3\left|\langle j|\boldsymbol{r}|k\rangle\right|^2$$

这里 $\omega_{kj}=E_k-E_j(E_k,E_j$ 分别为 k、j 态的能量)，$\langle j|\boldsymbol{r}|k\rangle$ 是位置矢量算符的矩阵元.

对于氢原子的一对态，$\langle j|\boldsymbol{r}|k\rangle$ 的大小具有 a_0 (Bohr 半径)的数量级. 辐射能量 $\hbar\omega_{kj}$ 是基态能量正值的数量级，即

$$\omega_{kj}\sim\frac{e^2}{4\pi\hbar a_0\varepsilon_0}$$

所以

$$A\sim\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{\hbar c^3}\left(\frac{1}{\hbar}\cdot\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{a_0}\right)^2\omega_{kj}a_0^2=\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{\hbar c}\right)^3\omega_{kj}=\alpha^3\omega_{kj}$$

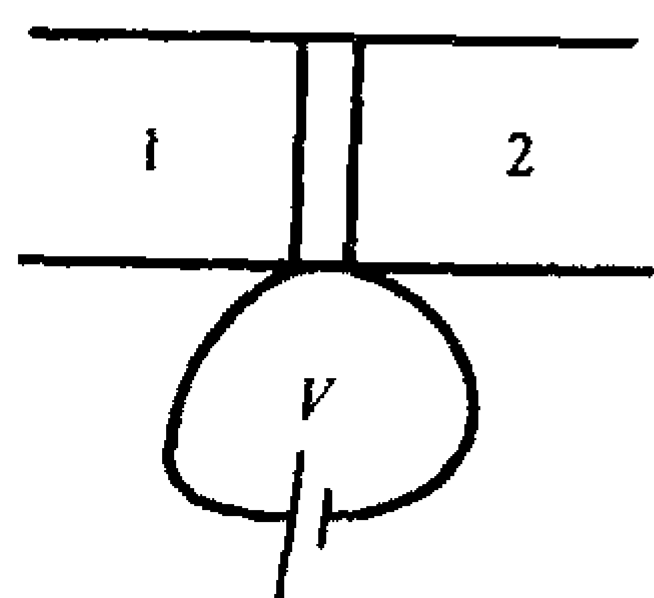
对于到基态的跃迁，频率展宽来自激发态能量的展宽. 由题 8.20 中的 r 在电偶极跃迁时正好等于 A，所以在跃迁时辐射的角频率宽度为 A. 而平均角频率是 ω_{kj}，相对圆频率宽度为

$$\frac{A}{\omega_{kj}} \sim \alpha^3$$

因为$\alpha \approx 0.007$，所以分数值数量级为10^{-6}.

讨论　圆频率宽度 A 称为谱线的自然宽度. 然而另有两个效应使谱线的宽度进一步展宽，即由于原子运动引起的 Doppler 效应，和由于原子碰撞引起的原子寿命减少. 在室温下和一个大气压的环境中，这两种效应引起的频率展宽远大于自然线宽. 通常这两种效应引起的展宽可以通过降低温度和减小气压来减少.

8.46　超导 Josephson 结的隧道电流与加稳定电压后的隧道电流



题图 8.46

题 8.46　超导 Josephson 结由两个相同的超导体 1 和 2 构成，中间被一块很薄的绝缘体隔开(题图 8.46). 设两边超导体内的 Cooper 电子对都处于相同的量子态(相位不同). 令 n_1 表示 1 中的电子对密度，它们的波函数可表示为

$$\psi_1 = n_1^{1/2}\exp(\mathrm{i}\theta_1)$$

这里θ_1是共同的相角. 类似有

$$\psi_2 = n_2^{1/2}\exp(\mathrm{i}\theta_2)$$

式中，ψ_i，n_i，θ_i $(i=1,\ 2)$都依赖于时间. ψ_1和ψ_2随时间的变化分别满足关系式

$$\frac{\partial\psi_1}{\partial t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(E_1\psi_1 + F\psi_2)$$

$$\frac{\partial\psi_2}{\partial t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(E_2\psi_2 + F\psi_1)$$

式中，E_1，E_2为 1 区与 2 区的超导电子的能量，$F\psi_2$(F 为实常数)表示从 2 通过遂道效应进入 1 的超导电子对. (1) 证明：$\frac{\partial n_1}{\partial t} = 2\Omega n\sin(\theta_2 - \theta_1)$，其中$\Omega = F/\hbar$，$n \approx n_1 \approx n_2$. (2) 由此证明，如果一个稳定电压 V 加在超导结上，则超导电流以频率$\gamma = 2eV/\hbar$振荡.

解　(1) 对$\psi_1 = n^{1/2}\exp(\mathrm{i}\theta_1)$取时间导数

$$\frac{\partial\psi_1}{\partial t} = \frac{1}{2n_1^{1/2}}\exp(\mathrm{i}\theta_1)\frac{\partial n_1}{\partial t} + \mathrm{i}n_1^{1/2}\exp(\mathrm{i}\theta_1)\frac{\partial\theta_1}{\partial t} \tag{1}$$

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(E_1\psi_1 + F\psi_2) = -\mathrm{i}\omega_1 n_1^{1/2}\exp(\mathrm{i}\theta_1) - \mathrm{i}\Omega n_2^{1/2}\exp(\mathrm{i}\theta_2) \tag{2}$$

其中$\omega_1 = E_1/\hbar$，$\Omega = F/\hbar$，令式(1)、(2)右边相等，同时两边再乘$n_1^{1/2}\exp(-\mathrm{i}\theta_1)$，可得

$$\frac{1}{2}\cdot\frac{\partial n_1}{\partial t} + \mathrm{i}n_1\frac{\partial\theta_1}{\partial t} = -\mathrm{i}\omega_1 n_1 - \mathrm{i}\Omega(n_1 n_2)^{1/2}\exp[\mathrm{i}(\theta_2 - \theta_1)] \tag{3}$$

利用式(3)中实部相等，同时用到$n_1 \approx n_2 \approx n$，可得到结果

$$\frac{\partial n_1}{\partial t} \approx 2\Omega n\sin(\theta_2 - \theta_1) \tag{4}$$

(2) 考虑到式(3)两边虚部相等，两边再除以n_1，利用$n_1 \approx n_2 \approx n$，可给出

$$\frac{\partial \theta_1}{\partial t} \approx -\omega_1 - \Omega \cos(\theta_2 - \theta_1) \tag{5}$$

对于 2 区类似式(5)有

$$\frac{\partial \theta_2}{\partial t} \approx -\omega_2 - \Omega \cos(\theta_2 - \theta_1) \tag{6}$$

式(5)、(6)相减，可得

$$\frac{\partial}{\partial t}(\theta_2 - \theta_1) = \omega_1 - \omega_2 = \frac{E_1 - E_2}{\hbar} = \frac{2eV}{\hbar} \tag{7}$$

式(7)最后一个等式是因为当电压 V 加在超导结上则两边的超导电子对的能量相差 2eV. 对式(7)积分，有

$$\theta_2 - \theta_1 = \frac{2eV}{\hbar} t + \delta \tag{8}$$

因为两个超导体之间的电子对电流正比于$\frac{\partial n_1}{\partial t}$，将式(8)代入式(4)，可知超导电子对电流的圆频率为

$$\gamma = \frac{2eV}{\hbar} \cdot \frac{1}{\sin\theta_f \cos\varphi_f}$$

式中

$$\cos\theta_f = \frac{k_z^{(i)} + k^{(e)}}{k_f}$$

$$\sin\theta_f = \frac{\sqrt{k_f^2 - (k_z^{(i)} + k_z^{(e)})^2}}{k_f}$$

$$\cos\varphi_f = \frac{\sqrt{k_f^2 \sin^2\theta_f - (k_y^{(i)} + k_y^{(e)})^2}}{k_f \sin\theta_f}$$

$$\sin\varphi_f = \frac{k_y^{(i)} + k_y^{(e)}}{k_f \sin\theta_f}$$

于是最后

$$\sigma_{\text{[illegible]}} = \frac{8\pi a e^2}{m\omega c} \cdot \frac{1}{\sqrt{k_f^2 - (k_y^{(i)} + k_y^{(e)})^2 - (k_z^{(i)} + k_z^{(e)})^2}}$$

$$\cdot \left\{ \frac{\varepsilon_x \left[\sqrt{k_f^2 - (k_y^{(i)} + k_y^{(e)})^2 - (k_z^{(i)} + k_z^{(e)})^2} - k_x^{(i)} \right] - \varepsilon_y k_y^{(e)} - \varepsilon_z k_z^{(e)}}{1 + a^2 \left[\sqrt{k_f^2 - (k_y^{(i)} + k_y^{(e)})^2 - (k_z^{(i)} + k_z^{(e)})^2} - k_x^{(i)} \right]^2} \right\}^2$$

8.47 两个具有弹性力与自旋相互作用的自旋为 1/2 的可分辨粒子在 $V(t)=\left(V_1+V_2\frac{z_1-z_2}{L}\right)f(t)\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{n}$ 作用下的跃迁概率幅

题 8.47 由两个可分辨，自旋 1/2 的粒子构成的系统 Hamilton 量

$$H_0=-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2-\frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2+\frac{1}{2}\left(\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}\right)\omega^2(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)^2+g\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2\ll\hbar\omega$$

(1) 此系统的能级如何？给出最低两个能级的波函数(不必归一化). (2) $t\to-\infty$ 时系统处于基态，一个含时外场 $V(t)$ 施于系统上

$$V(t)=\left(V_1+V_2\frac{z_1-z_2}{L}\right)f(t)\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{n}$$

式中，$\boldsymbol{n}=(\sin\theta\cos\phi,\ \sin\theta\sin\phi,\ \cos\theta)$. $|t|\to\infty$ 时 $f(t)\to0$. 推导出一系列概率幅 $C_n(t)$ 所满足的耦合方程

$$C_n(t)=\langle n|\psi(t)\rangle$$

式中，n 是 H_0 的本征态，$\psi(t)$ 是含时波函数.

(3) 对下列情形

$$f(t)=\begin{cases}0, & t<0\ \text{或}\ t>\tau\\ 1, & 0<t<\tau\end{cases}$$

计算 $C_n(\infty)$. 假定 $\frac{g\tau}{\hbar}\ll1$ 且 V_2 很小. 计算到 V_2 的一级并标明量子数.

解 令

$$\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2$$

$$\boldsymbol{R}=\frac{m_1\boldsymbol{r}_1+m_2\boldsymbol{r}_2}{m_1+m_2}$$

$$\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2=\frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)$$

则 Hamilton 量化为

$$H_0=-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2+\frac{\mu}{2}\omega^2r^2+2g\left[S(S+1)-\frac{3}{2}\right]$$

式中，$M=m_1+m_2$，$\mu=\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}$，$S$ 是总自旋. 则系统的能级为

$$E_{nS}=\frac{P_R^2}{2M}+\left(n+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega+2g\left[S(S+1)-\frac{3}{2}\right]$$

基态：$E_{00}=\frac{3}{2}\hbar\omega-3g$，$\psi_0=|0\rangle\alpha_{00}$.

第一激发态：$E_{01}=\frac{3}{2}\hbar\omega+g$，$\psi_1=|0\rangle\alpha_{10}$，$\alpha_{1,\pm1}$，式中$|0\rangle$是谐振子基态波函数，而$\alpha_{SM}$则是耦合自旋波函数.

(2) $|\psi(t)\rangle=\sum C_n(t)\exp(-\mathrm{i}E_nt/\hbar)|n\rangle$，$H_0|n\rangle=E_n|n\rangle$. 而

$$[H_0+V(t)]\psi(t)=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

从而可得

$$\mathrm{i}\hbar\dot{C}_n(t)=\sum_m\langle n|V(t)|m\rangle\exp[-\mathrm{i}(E_m-E_n)t/\hbar]C_m(t)$$

这就是所求的耦合方程.

(3) 初态为$|000\alpha_{00}\rangle$. 设末态为$|nlm\alpha_{SM}\rangle$，并由

$$\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{n}=\sin\theta\cos\varphi\sigma_{1x}+\sin\theta\sin\varphi\sigma_{1y}+\cos\theta\sigma_{1z}$$

有

$$\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{n}\alpha_{00}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\sin\theta\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\alpha_{1-1}-\sin\theta\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\alpha_{11}+\sqrt{2}\cos\theta\alpha_{10})$$

$$\begin{aligned}&\langle nlm\alpha_{SM}|\sigma_{1x}|\alpha_{00}000\rangle\\&=\left\langle nlm\alpha_{SM}\left|-\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{11}\alpha_{1-1}-\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{1-1}\alpha_{11}+\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{10}\alpha_{10}\right|000\right\rangle\\&=\sqrt{\frac{1}{3}}\delta_{n,0}\delta_{l1}\delta_{S1}(\delta_{m0}\delta_{M0}-\delta_{m1}\delta_{M-1}-\delta_{m1}\delta_{M1-1})=0\end{aligned}$$

(因为$n=0$时，l必须为 0). 因此，在一级近似下，$V(t)$中的第一项$V_1f(t)\sigma_1\cdot\hat{x}$对跃迁无贡献.

$$\begin{aligned}&\langle nlm\alpha_{SM}|r\cos\theta\sigma_{1x}|\alpha_{00}000\rangle\\&=\left\langle nlm\alpha_{SM}\left|r\left(-\sqrt{\frac{4\pi}{15}}Y_{21}\alpha_{1-1}-\sqrt{\frac{4\pi}{15}}Y_{2-1}\alpha_{11}+\frac{1}{3}\sqrt{\frac{16\pi}{5}}Y_{20}\alpha_{10}+\frac{1}{3}\alpha_{10}\right|000\right\rangle\\&=\lambda_1\delta_{l,2}\delta_{S,1}\left(\frac{2}{3\sqrt{5}}\delta_{m,0}\delta_{M,0}-\frac{1}{\sqrt{15}}\delta_{m,1}\delta_{M,-1}-\frac{1}{\sqrt{15}}\delta_{m,-1}\delta_{M,1}\right)+\frac{1}{3}\lambda_1\delta_{l,0}\delta_{m,0}\delta_{M,0}\end{aligned}$$

式中，$\lambda_1=\int_0^\infty R_{nl}R_{00}r^3dr=\int_0^\infty R_{n2}R_{00}r^3dr$. 对于三维谐振子$n=l+2n_r=2(1+n_r)$，所以$n$必须是偶数.

$$C_n(\infty)=\frac{1}{i\hbar}\int_0^{\infty} e^{i\omega_{n,0}t}\langle nlm\alpha_{SM}|V(t)|000\alpha_{00}\rangle dt$$

$$=\frac{1}{i\hbar}\int_0^{\tau} e^{in\omega t}dt\left\langle nlm\alpha_{SM}\left|\left(V_1+V_2\frac{z}{L}\right)\sigma_{1x}\right|000\alpha_{00}\right\rangle$$

$$=\frac{1}{n\omega\hbar}(e^{in\omega\tau}-1)\left\langle nlm\alpha_{SM}\left|\left(\frac{V_2}{L}r\cos\theta\sigma_{1x}\right)\right|000\alpha_{00}\right\rangle$$

$$C_{2k-1}(\infty)=0$$

$$C_{2k}(\infty)=\frac{1}{2k\hbar\omega}(e^{i2k\omega\tau}-1)\frac{V_2}{L}\lambda_1\delta_{S,1}\left(\frac{2}{3\sqrt{5}}\delta_{m,0}\delta_{M,0}-\frac{1}{\sqrt{15}}\delta_{m,1}\delta_{M,-1}-\frac{1}{\sqrt{15}}\delta_{m,-1}\delta_{M,1}\right)$$

式中，$k=1, 2, 3, \cdots, l=2$

$$\lambda_1=\int_0^{\infty} r^3 R_{(2k)2}R_{00}dr$$

第9章 少体问题

9.1 两个无相互作用的可区分粒子分别受力 $-Kx_i$ 吸引，求本征函数与本征值

题 9.1 在一维空间，一个质量为 m 的粒子被线性力 $-Kx$ 吸向原点. 其 Schrödinger 方程具有如下本征函数

$$\psi_n(\xi)=H_n(\xi)\exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right),\qquad \xi=\left(\frac{mK}{\hbar^2}\right)^{1/4}x$$

式中，H_n 是 n 阶 Hermite 多项式. 本征值为 $E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$，而 $\omega=(K/m)^{1/2}$. 考虑两个没有相互作用的可区分粒子($i=1,2$)，每个质量为 m，分别被力 $-Kx_i$ 吸向原点. 用下列每种坐标系，写下两粒子体系本征函数的表达式、本征值及其简并度：(1) 单粒子坐标 x_1 和 x_2. (2) 相对坐标 $x=x_2-x_1$ 和质心坐标 $X=\dfrac{x_1+x_2}{2}$.

解 (1) 采用坐标 x_1，x_2 时，体系的 Hamilton 量为

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x_1^2+\frac{1}{2}m\omega^2x_2^2=H_1+H_2$$

能量本征函数可取为 $\{H_1, H_2\}$ 的共同本征函数

$$\psi(x_1, x_2)=\psi(x_1)\psi(x_2)$$
$$E=E_1+E_2$$

根据题设条件即知

$$\psi_{nm}(x_1,x_2)=H_n(\alpha x_1)H_m(\alpha x_2)\exp\left[-\frac{1}{2}\alpha^2(x_1^2+x_2^2)\right]$$
$$E_{nm}^{(N)}=(n+m+1)\hbar\omega=(N+1)\hbar\omega$$

式中

$$\alpha=\left(\frac{mK}{\hbar^2}\right)^{1/4},\qquad \omega=\left(\frac{K}{m}\right)^{1/2}$$

能级 $E_{nm}^{(N)}$ 的简并度等于满足条件 $n+m=N$ 的非负整数对 (n,m) 数

$$f^{(N)}=N+1$$

(2) 采用坐标 $x=x_2-x_1$ 和 $X=\dfrac{x_1+x_2}{2}$ 时，体系的 Hamilton 量为

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2}{\partial X^2}-\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}M\omega^2X^2+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2$$

式中，$M=2m$，$\mu=\dfrac{1}{2}m$，$\omega=\left(\dfrac{K}{m}\right)^{1/2}$.

类似(1)容易得到

$$\psi_{nm}(X,x)=H_n(\alpha X)H_m(\beta x)\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\alpha^2X^2+\beta^2x^2\right)\right]$$

$$E_{nm}^{(N)}=(n+m+1)\hbar\omega=(N+1)\hbar\omega$$

$$f^{(N)}=N+1$$

式中，$\alpha=\left(\frac{M\omega}{\hbar}\right)^{1/2}$，$\beta=\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^{1/2}$.

9.2 两个全同线性振子在相互作用势 $H=\varepsilon x_1x_2$ 下的精确能级

题 9.2 考虑两个全同的线性振子，弹性常数为 K，相互作用势为 $H=\varepsilon x_1x_2$，其中 x_1 和 x_2 为振动坐标. (1) 求出精确的能级. (2) 假定 $\varepsilon\ll K$，准确到 ε/K 的一阶，给出能级.

解 (1)

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x_1^2+\frac{1}{2}m\omega^2x_2^2+\varepsilon x_1x_2$$

式中，$\omega^2=\frac{K}{m}$. 作自变量代换 $x_1=\frac{1}{\sqrt{2}}(y_1+y_2)$, $x_2=\frac{1}{\sqrt{2}}(y_1-y_2)$，可将 H 用 y_1、y_2 表示成

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2}{\partial y_1^2}-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2}{\partial y_2^2}+\frac{1}{2}(m\omega^2+\varepsilon)y_1^2+\frac{1}{2}(m\omega^2-\varepsilon)y_2^2$$

上式可看成是 y_1 和 y_2 两个独立谐振动. 总能量为

$$E_{mn}=\left(m+\frac{1}{2}\right)\hbar\sqrt{\omega^2+\frac{\varepsilon}{m}}+\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\sqrt{\omega^2-\frac{\varepsilon}{m}}$$

式中，m，$n=0$，1，2，…

(2) $\varepsilon\ll K$ 情况下，精确到 ε/K 的一阶项，能级为

$$E_{mn}=\left(m+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\left(1+\frac{\varepsilon}{K}\right)^{\frac{1}{2}}+\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\left(1-\frac{\varepsilon}{K}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\approx(m+n+1)\hbar\omega+(m-n)\hbar\omega\frac{\varepsilon}{2K}$$

9.3 一维谐振子势阱中两个全同粒子的基态波函数

题 9.3 (1) 写出一维谐振子的 Hamilton 量及 Schrödinger 方程. (2) 若 $xe^{-\nu x^2}$ 是一个解，求 ν 并给出能量 E_1 和期望值 $\langle x\rangle$，$\langle x^2\rangle$，$\langle p^2\rangle$，$\langle px\rangle$. (3) 证明处在单一的一维谐振子势阱中的两个相同粒子基态，既可写为 $\phi_0(m,x_1)\phi_0(m,x_2)$，又可写为

$$\phi_0\left(2m,\ \frac{x_1+x_2}{2}\right)\phi_0\left(\frac{m}{2},\ x_1-x_2\right)$$

式中，$\phi_0(m,\ x)$ 是质量为 m 的单个粒子基态解.

解 (1) Hamilton 量为

$$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

定态 Schrödinger 方程为

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi(x)=E\psi(x)$$

(2)

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}(x\mathrm{e}^{-\nu x^2})=-2\nu(3-2\nu x^2)x\mathrm{e}^{-\nu x^2}$$

$$H(x\mathrm{e}^{-\nu x^2})=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}(-2\nu)(3-2\nu x^2)+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]x\mathrm{e}^{-\nu x^2}$$

$$=\left[\frac{3\hbar^2}{m}\nu+\left(\frac{1}{2}m\omega^2-\frac{2\hbar^2\nu^2}{m}\right)x^2\right]x\mathrm{e}^{-\nu x^2}$$

$$=E_1(x\mathrm{e}^{-\nu x^2})$$

所以

$$\begin{cases}\dfrac{1}{2}m\omega^2-\dfrac{2\hbar^2\nu^2}{m}=0\\ E_1=\dfrac{3\hbar^2}{m}\nu\end{cases}$$

从而得

$$\begin{cases}\nu=\dfrac{m\omega}{2\hbar}\\ E_1=\dfrac{3}{2}\hbar\omega\end{cases}$$

由对称性可知

$$\langle x\rangle=0$$

由 Virial 定理得

$$\frac{1}{2m}\left\langle p^2\right\rangle=\frac{1}{2}m\omega^2\left\langle x^2\right\rangle=\frac{3}{4}\hbar\omega$$

所以

$$\left\langle P^2\right\rangle=\frac{3}{2}m\hbar\omega,\qquad\left\langle x^2\right\rangle=\frac{3}{2}\frac{\hbar}{m\omega}$$

为求 $\langle px\rangle\equiv\langle 1|px|1\rangle$，注意按对易子运算规则可得

$$[x,Hx]=\frac{\mathrm{i}\hbar}{m}px,\qquad[x,xH]=\frac{\mathrm{i}\hbar}{m}xp$$

将两式相加，得

$$\frac{i\hbar}{m}(px+xp)=-Hx^2+x^2H$$

由于

$$\langle 1|Hx^2-x^2H|1\rangle=0$$

所以

$$\langle px\rangle=-\langle xp\rangle$$

又

$$[x,p]=i\hbar$$

所以

$$\langle [x,p]\rangle=\langle xp\rangle-\langle px\rangle=i\hbar$$

$$\langle px\rangle=-\frac{i\hbar}{2}$$

注意此结论对谐振子的任意态均成立.

(3) Schrödinger 方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2+\nabla_2^2)+\frac{1}{2}m\omega^2(x_1^2+x_2^2)\right]\psi(x_1,\ x_2)=E\psi(x_1x_2)$$

令 $\psi(x_1,x_2)=\phi(x_1)\phi(x_2)$，则

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2+\frac{1}{2}m\omega^2x_i^2\right)\phi(x_i)=E_i\phi(x_i)\text{，}\qquad i=1,\ 2$$

$$E=E_1+E_2$$

这是两者之间无耦合的两个相同的谐振子，对基态有

$$\psi_0(x_1,x_2)=\phi_0(m,\ x_1)\phi_0(m,\ x_2)$$

另一方面可引入 Jacobi 坐标

$$\frac{1}{2}(x_1+x_2)=R\text{，}\qquad x_1-x_2=r$$

因此，Schrödinger 方程化为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{2}\nabla_R^2+2\nabla_r^2\right)+\frac{1}{2}m\omega^2\left(2R^2+\frac{1}{2}r^2\right)\right]\psi(R,\ r)=E\psi(R,r)$$

也可化为两个彼此独立的谐振子方程，分别代表质心运动和相对运动

$$\left(-\frac{\hbar^2}{4m}\nabla_R^2+m\omega^2R^2\right)\Phi(R)=E_R\Phi(R)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{m}\nabla_r^2+\frac{1}{4}m\omega^2r^2\right)\Phi(r)=E_r\Phi(r)$$

因此基态波函数又可写成

$$\psi_0(x_1, x_2) = \phi_0(2m, R)\phi_0\left(\frac{m}{2}, r\right) = \phi_0\left(2m, \frac{x_1+x_2}{2}\right)\phi_0\left(\frac{m}{2}, x_1 - x_2\right)$$

9.4 两个相互之间以弹性力联系的谐振子

题 9.4 考虑两个质量 $m_1 \neq m_2$ 的粒子通过下述 Hamilton 量相互作用

$$H = \frac{P_1^2}{2m_1} + \frac{P_2^2}{2m_2} + \frac{1}{2}m_1\omega^2 x_1^2 + \frac{1}{2}m_2\omega^2 x_2^2 + \frac{1}{2}K(x_1 - x_2)^2$$

(1) 求出准确解. (2) 在弱耦合极限 $K \ll \mu\omega^2$ 下，画出能谱，这里 μ 是约化质量.

解 (1) 令 $R = (m_1x_1 + m_2x_2)/(m_1 + m_2)$ ，$r = x_1 - x_2$ ，由此给出

$$\frac{d^2}{dx_1^2} = \left(\frac{m_1}{m_1 + m_2}\right)^2 \frac{d^2}{dR^2} + 2\frac{m_1}{m_1+m_2}\cdot\frac{d^2}{drdR} + \frac{d^2}{dr^2}$$

$$\frac{d^2}{dx_2^2} = \left(\frac{m_2}{m_1 + m_2}\right)^2 \frac{d^2}{dR^2} - 2\frac{m_2}{m_1+m_2}\cdot\frac{d^2}{dRdr} + \frac{d^2}{dr^2}$$

及

$$x_1^2 = R^2 + 2\frac{m_2}{m_1+m_2}Rr + \frac{m_2^2}{(m_1+m_2)^2}r^2$$

$$x_2^2 = R^2 - 2\frac{m_1}{m_1+m_2}Rr + \frac{m_1^2}{(m_1+m_2)^2}r^2$$

所以

$$H = -\frac{\hbar^2}{2(m_1+m_2)}\cdot\frac{d^2}{dR^2} - \frac{\hbar^2}{2}\cdot\frac{m_1+m_2}{m_1m_2}\cdot\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{2}(m_1+m_2)\omega^2R^2 + \frac{1}{2}\cdot\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}\omega^2r^2 + \frac{1}{2}Kr^2$$

令

$$M = m_1 + m_2, \qquad \mu = \frac{m_1m_2}{m_1+m_2}$$

则运动方程变为

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2M}\cdot\frac{d^2}{dR^2} + \frac{1}{2}M\omega^2R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\mu}{2}\left(1+\frac{K}{\mu\omega^2}\right)\omega^2r^2\right]\psi(R, r) = E\psi(R, r)$$

化为两个独立的谐振子方程，能量与波函数分别为

$$E = E_{lm} = E_l + E_m = \left(l+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \left(m+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\sqrt{1+\frac{K}{\mu\omega^2}}$$

$$\psi_{lm}(R, r) = \psi_l(R)\psi_m(r) = N_lN_m\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha_1^2R^2\right)H_l(\alpha_1R)\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha_2^2r^2\right)H_m(\alpha_2r)$$

式中

$$
\begin{cases} \alpha_1 = \sqrt{\dfrac{M\omega}{\hbar}} \\ \alpha_2 = \sqrt{\dfrac{\mu\omega}{\hbar}\sqrt{1+\dfrac{K}{\mu\omega^2}}} \end{cases}, \qquad \begin{cases} N_l = \left(\dfrac{\alpha_1}{\sqrt{\pi}2^l l!}\right)^{1/2} \\ N_m = \left(\dfrac{\alpha_2}{\sqrt{\pi}2^m m!}\right)^{1/2} \end{cases}
$$

(2) 当 $K \ll \mu\omega^2$ 时，若取 $\sqrt{1+\dfrac{K}{\mu\omega^2}} \approx 1$ 则有

$$
E_{lm} \approx (l+m+1)\hbar\omega = (N+1)\hbar\omega, \qquad N = l+m = 0,\ 1,\ 2,\ \cdots
$$

即对第 N 能级有 $(N+1)$ 重简并

$N \cdots \quad \cdots$

$N=3 \quad l=3,\ m=0;\ l=2,\ m=1;\ l=1,\ m=1,\ l=0,\ m=3$

$N=2 \quad l=2,\ m=0;\ l=1,\ m=1;\ l=0,\ m=2$

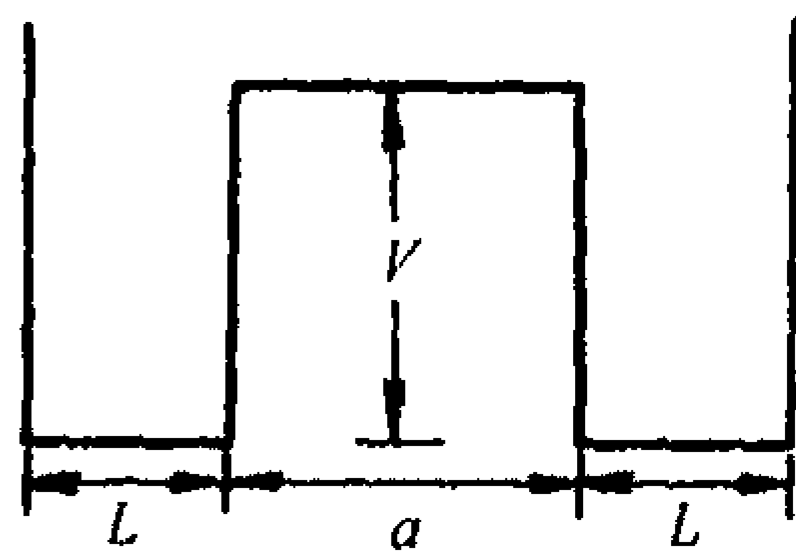
$N=1 \quad l=1,\ m=0;\ l=0,\ m=1$

$N=0 \quad l=m=0$

若取 $\sqrt{1+\dfrac{K}{\mu\omega^2}} = 1+\dfrac{K}{2\mu\omega^2}+\cdots$，则在上面的能级图中，$m$ 相同的能级均向上移动 $\left(m+\dfrac{1}{2}\right)\hbar\omega\left(\dfrac{K}{2\mu\omega^2}+\cdots\right)$ 解除原来的简并.

9.5 用一高势垒隔开的无限深方势阱中的两全同 Bose 子

题 9.5 势的形式如题图 9.5(a)所示，其中 V 是一个很大但有限的势. (1) 如果一个粒子原来处于一个阱中，给出一个关于粒子穿透到另一阱中的透穿率的量级公式. (2) 画出最低两个态的波函数. (3) 如果有两个具有小的排斥力的全同 Bose 子位于阱中，分别就粒子间力很小和很大两种情况写出最低的两个态的近似波函数.



题图 9.5(a)

解 (1) 记基态为 ψ_1，第一激发态为 ψ_2，则 ψ_1 关于势阱对称轴是对称的，ψ_2 是反对称的. 我们可以认为初态波函数为(粒子初始位于左半阱中)

$$
\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 + \psi_2)
$$

参阅(2)中所给出的图像，则可知这是一个好近似，于是

$$
\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_1 e^{-iE_1 t/\hbar} + \psi_2 e^{-iE_2 t/\hbar}\right)
$$

当 $\dfrac{e^{-iE_1 t_0/\hbar}}{e^{-iE_2 t_0/\hbar}} = -1$ 时，则

$$
\psi(x,t_0) = c\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 - \psi_2), \qquad |c|^2 = 1
$$

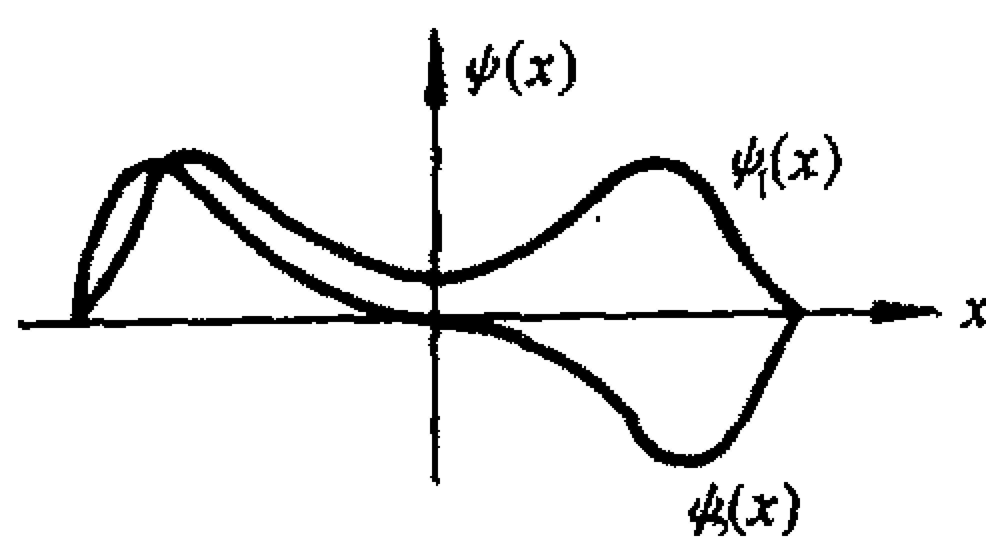
这时粒子便在另一阱中了(概率大). 这时

$$t_0 = \frac{\pi\hbar}{E_2 - E_1} = \frac{\pi\hbar}{\Delta E}$$

由于 V 很大，$\Delta E \approx E_2 - E_1 = \frac{\hbar^2}{2mL^2}(2^2 - 1) = \frac{3\hbar^2}{2mL^2}$. E_1, E_2 是宽 L 无限深方阱的基态和第一激发态的能级. 透射率(单位时间内穿透的振幅)的量级为

$$\beta \sim \frac{1}{t_0} = \frac{3\hbar}{2m\pi L^2}$$

(2) 最低两个态的波函数图形如题图 9.5(b)所示.



题图 9.5(b)

(3) 当排斥势远小于 V 时，两个最低能态的波函数近似为

$$\psi_{\rm I} = \psi_1(1)\psi_1(2)$$

$$\psi_{\rm II} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(1)\psi_2(2) + \psi_2(1)\psi_1(2)]$$

当排斥势远大于 V 时，中间势垒的穿透将会很小，所求波函数近似为

$$\psi'_{\rm I} = \frac{1}{2}[\psi_1(1) - \psi_2(1)][\psi_1(2) + \psi_2(2)]$$

$$\psi'_{\rm II} = \frac{1}{2}[\psi_1(1) + \psi_2(1)][\psi_1(2) - \psi_2(2)]$$

9.6 以弹性力相联系的两粒子体系的对称性及基态波函数

题 9.6 考虑一体系，由以下 Schrödinger 方程定义

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + \frac{k}{2}|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|^2\right]\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = E\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$$

(1) 列出这个 Schrödinger 方程的所有的对称性. (2) 指出所有的运动常数. (3) 指出基态波函数的形式. 你可以假设一维谐振子的基态波函数是 Gauss 型的函数.

解 (1) 这个 Schrödinger 方程具有下列对称性：时间平移，空间反演，体系整体平移，$\boldsymbol{r}_1 \leftrightarrow \boldsymbol{r}_2$ 交换，Galileo 变换对称性.

(2) 令

$$\begin{cases} \boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2 \\ \boldsymbol{R} = \dfrac{1}{2}(\boldsymbol{r}_1 + \boldsymbol{r}_2) \end{cases}$$

则原方程变为

$$\left(-\frac{\hbar^2}{4m}\nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{m}\nabla_r^2 + \frac{k}{2}r^2\right)\psi(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r})$$

方程化为质量为$2m$的质心运动和质量为$m/2$的相对的简谐振动. 质心部分是自由运动,所以P_R^2,P_X,P_Y,P_Z,E_R,L_R^2,L_X,L_Y,L_Z是运动常数;相对运动部分E_r,L_r^2,L_x是运动常数;宇称是运动常数.

(3) 由(2)中分解方程可知,基态波函数形式为

$$\psi \sim \mathrm{e}^{\mathrm{i}pR/\hbar}\mathrm{e}^{-r^2/a}$$

9.7 处于谐振子势中的两全同 Bose 子通过$V_{\text{int}}(x_1,x_2)=\alpha\mathrm{e}^{-\beta(x_1-x_2)^2}$相互作用

题 9.7 两个全同 Bose 子,每个质量为m,在一维谐振子势$V=\dfrac{1}{2}m\omega^2x^2$中运动. 它们彼此通过势

$$V_{\text{int}}(x_1,x_2)=\alpha\mathrm{e}^{-\beta(x_1-x_2)^2}$$

相互作用,这里β是个正参数. 计算体系的基态能量. 近似到相互作用强度参数α的第一阶.

解 由于是 Bose 子,两个粒子可以同时处于基态,所以体系的基态波函数为

$$\psi_0(x_1,x_2)=\psi_0(x_1)\psi_0(x_2)=\frac{\alpha_0}{\sqrt{\pi}}\exp\left[-\frac{1}{2}\alpha_0^2(x_1^2+x_2^2)\right],\quad \alpha_0=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

基态能量为

$$\begin{aligned}\langle V_{\text{int}}\rangle &= \iint_{-\infty}^{\infty}\psi_0^*(x_1,\ x_2)\,V_{\text{int}}(x_1,x_2)\psi_0(x_1,x_2)\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2 \\ &= \frac{\alpha_0^2\alpha}{\pi}\iint_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\alpha_0^2(x_1^2+x_2^2)-\beta(x_1-x_2)^2\right]\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2 \\ &= \frac{\alpha_0\alpha}{(\alpha_0^2+2\beta)^{1/2}}\end{aligned}$$

9.8 由两个全同粒子组成的系统中,对称态与反对称态的数目比

题 9.8 (1) 证明对于一个由两个全同粒子组成的系统,每个粒子可以处于n个量子态中的一个态,则系统有$\dfrac{1}{2}n(n+1)$个交换对称态和$\dfrac{1}{2}n(n-1)$个交换反对称态;(2) 证明若粒

子的自旋为 I，则对称自旋态与反对称自旋态的比率为$(I+1):I$.

证明 (1) 如果有 n 个单粒子态，则系统存在 n 个这样的对称态，两个粒子都处于同样的单态. 而系统处于另一种交换对称态的数目(这种态中两个粒子处于不同的单态)等于从 n 个不同的物体中任选两个的不同组合的数目，即 $\frac{1}{2}n(n-1)$. 所以对称态的总数为

$$n+\frac{1}{2}n(n-1)=\frac{1}{2}n(n+1)$$

交换反对称的态的个数为 $\frac{1}{2}n(n-1)$，因为两个粒子都处于同一单态的系统量子态不可能组成反对称态.

(2) 如果粒子具有自旋 I，则有 $2I+1$ 个单粒子自旋态(相应于 $2I+1$ 个不同的 m 值，这 m 值给出自旋角动量在空间任意方向的分量). 由(1)可知，这时系统的对称态数目为

$$n_s=(I+1)(2I+1)$$

和反对称态的数目为

$$n_a=I(2I+1)$$

两者之比为 $(I+1)/I$.

9.9 无限深势阱中的两个无相互作用粒子

题 9.9 两个无相互作用的粒子，质量相同为 m，处于一维无限深势阱中，势阱宽为 $2a$，在阱中势为零，阱外势无限大. (1) 求系统四个最低能级的值是多少? (2) 求这些能级的简并度，如果这两个粒子 (i) 是全同粒子，自旋为 $\frac{1}{2}$；(ii) 不是全同粒子，自旋都为 $\frac{1}{2}$；(iii) 全同粒子，自旋为 1.

解 (1) 在这样的一维势中，单粒子空间波函数为

$$\psi_n(x)=\frac{1}{\sqrt{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{2a}\right)$$

式中，n 为正整数，相应的能量为 n^2E_0. 这里

$$E_0=\frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$$

两个粒子分别处于 n_1 和 n_2 态时，系统的双粒子态可表示为

$$\psi(x_1,x_2)=\frac{1}{a}\sin\left(\frac{n_1\pi x_1}{2a}\right)\sin\left(\frac{n_2\pi x_2}{2a}\right)$$

此态具有能量

$$E=(n_1^2+n_2^2)E_0$$

因此，最低的四个能级为

(n_1,n_2)	E/E_0
(1, 1)	2

(2, 1)	5
(2, 2)	8
(3, 1)	10

(2) (i) 系统态函数可以表示成空间波函数和自旋波函数的乘积. 因为粒子是全同 Fermi 子，态必须是反对称的，这时若空间波函数是对称的，则自旋波函数是反对称的，否则空间波函数是反对称的，自旋波函数是对称的，因为粒子自旋 $I=\dfrac{1}{2}$，由上题结果可知，有 3 个对称自旋态和一个反对称自旋态 (3 个对称态的总自旋为 1，称三重态；反对称态总自旋为 0，称单态.)

因为空间态(1, 1)是对称的，所以整个波函数是空间态(1, 1)乘上自旋 $S=0$ 的单态. 因此，能级简并度为 1. 归一化的波函数为

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{2}a}\sin\left(\frac{\pi x_1}{2a}\right)\sin\left(\frac{\pi x_2}{2a}\right)(\alpha_1\beta_2-\beta_1\alpha_2)$$

这里 α 或 β 表示自旋朝上或朝下的自旋态，下标 1，2 表示不同的粒子.

空间态(2, 1)可以是对称的也可能是反对称的，前者须乘反对称的 $S=0$ 的自旋态，而后者应乘三重态 $S=1$. 所以第二个能量的简并度为 4，它们之中的两个为

$$\psi=\frac{1}{2a}\left[\sin\left(\frac{2\pi x_1}{2a}\right)\sin\left(\frac{\pi x_2}{2a}\right)+\sin\left(\frac{\pi x_1}{2a}\right)\sin\left(\frac{2\pi x_2}{2a}\right)\right](\alpha_1\beta_2-\beta_1\alpha_2)$$

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{2}a}\left[\sin\left(\frac{2\pi x_1}{2a}\right)\sin\left(\frac{\pi x_2}{2a}\right)-\sin\left(\frac{\pi x_1}{2a}\right)\sin\left(\frac{2\pi x_2}{2a}\right)\right]\alpha_1\alpha_2$$

一般来说相应于空间态 n_1，n_2 的简并度当 $n_1=n_2$ 时为 1；当 $n_1\neq n_2$ 时是 4.

(ii) 如果粒子是非全同粒子，则系统的波函数没有对称性或反对称性的约束，这时若 $n_1\neq n_2$ 则有两个空间态具有相同的能量，它们是 $\dfrac{1}{a}\sin\left(\dfrac{2\pi x_1}{2a}\right)\sin\left(\dfrac{\pi x_2}{2a}\right)$ 和 $\dfrac{1}{a}\sin\left(\dfrac{\pi x_1}{2a}\right)\sin\left(\dfrac{2\pi x_2}{2a}\right)$. 每个空间波函数可以乘上四个自旋波函数 $\alpha_1\alpha_2$，$\alpha_1\beta_2$，$\beta_1\alpha_2$，$\beta_1\beta_2$ 中的一个，故总的简并度为 8. 如果 $n_1=n_2$ 则简并度为 4.

(iii) 具有整数自旋的全同粒子波函数是对称的，所以对称的空间波函数需乘上对称的自旋波函数，反之亦然. 由上题可知自旋为 1 的两个全同粒子有 6 个对称的 3 个反对称的自旋态. 于是空间态(1, 1)是对称的必须乘上 6 个对称自旋态之一. 空间态(2, 1)有对称态和反对称态，需分别乘上反对称与对称自旋态，导致总的简并度为 9. 类似可计算出空间态(2, 2)和(3, 1)的简并度分别为 6 与 9. 结果可归纳在下表中

能级	简并度		
E/E_0	(i)	(ii)	(iii)
2	1	4	6
5	4	8	9
8	1	4	6
10	4	8	9

9.10　各向同性谐振子势中的两个无相互作用粒子

题 9.10　两个无相互作用的全同粒子处于一个各向同性的谐振子势中，试证明三个最低能级的简并度是 (1) 1，12，39，如果粒子自旋为$\frac{1}{2}$；(2) 6，27，99，如果粒子自旋为 1.

证明　在各向同性谐振势中单粒子态可由 3 个整数表征，即n_1，n_2，n_3；相应的能量为$\left(n+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega$，这里$n=n_1+n_2+n_3$. 三个最低的能量相应于

N	n_1	n_2	n_3
0	0	0	0
1	1	0	0
2	2	0	0
	1	1	0

上面每一组(除了第一组)都可以重新排列给出另外的态. 对两个无相互作用粒子，总的空间波函数是两个单粒子态的乘积，能量是单粒子能量之和.

(1) 对于自旋$\frac{1}{2}$全同粒子，总波函数反对称. 其空间波函数表示为(0，0，0) (0，0，0)，表明两个粒子都处于$n_1=n_2=n_3=0$的单粒子态上. 空间波函数是对称的乘上自旋单态，故基态是不简并的. 第二个能级的空间波函数可用(1，0，0)(0，0，0)表示，表明第一个粒子处于(1，0，0)态而第二个粒子处于(0，0，0)态. (1，0，0)(0，0，0)态可构成对称或反对称的空间波函数，再与反对称与对称自旋波函数相乘后由上题(2) (i)可知可得到 4 个波函数. 另外空间波函数里的整数 1 也可以放在第二或第三个位置上(得到相同的能量)，故第二能量的简并度为$3\times4=12$.

第三个能级可以由下列组合的空间态得到

(2，0，0)(0，0，0)

(1，1，0)(0，0，0)

(0，1，0)(0，0，1)(两个 1 在不同位置)

(1，0，0)(1，0，0)(两个 1 在相同位置)

前三个组合是两个粒子处于不同的空间态，每一个导致 12 个态(同上). 第四种组合是对称空间波函数只能乘反对称自旋波函数，但是整数 1 可以有 3 种位置，故可产生 3 个态. 这一能级的总简并度为$(3\times12)+3=39$.

(2) 对于自旋为 1 的两个全同粒子有 6 个对称 3 个反对称自旋波函数，总的波函数应是对称的. 对于基态只有一个对称空间波函数，它与 6 个对称自旋态结合，给出 6 个简并态.

对于第二个能级态(1，0，0)(0，0，0)它可以构成对称或反对称空间波函数与 9 个自旋波函数之一相乘，再考虑到整数 1 有三个可能位置，故总的简并度为$3\times9=27$. 对于第三个能级，(1)中的前三种组合各给出 27 个简并态，最后一种组合给出 6 个简并态，再全部

乘上 3；此能级的总简并度为$(3\times 27)+3\times 6=99$.

9.11 $\rho^0\to\pi^0+\pi^0$的衰减过程是不可能的

题 9.11 ρ^0介子有自旋 1，π^0介子自旋为零. 证明衰减过程$\rho^0\to\pi^0+\pi^0$是不可能的.

证明 因为ρ^0介子自旋为 1，而π^0介子自旋为 0，如果衰变过程发生，为了保持角动量守恒，两个π^0介子处于角动量量子数$L=1$的轨道态. 然而$L=1$的态具有奇宇称，它是空间反对称态. (对于一个两粒子系统，宇称和空间波函数的交换对称性是一致的，因为通过原点反射空间波函数即交换了两个粒子，而通过原点反射自旋它并不改变. 所以自旋波函数的宇称总是正的.)因为π^0介子自旋为零，它们的自旋波函数是对称的，所以两个π^0介子的总的波函数是反对称的. 但是π^0介子是 Bose 子，双 Bose 子系统应具有对称的波函数，所以此衰变过程是不可能的.

9.12 π^-介子与氘核作用形成的两个中子的状态和宇称

题 9.12 π^-介子和一个氘核作用(开始时氘核处于S轨道态)形成两个中子.

(1) 证明中子处于态$L=1$，$S=1$，$J=1$；(2) 由此推论π^-的内部宇称.(π^-具有自旋 0，氘核自旋为 1.)

证明 (1) 上述反应过程是

$$\pi^-+d\to n+n$$

因为π^-自旋为 0，氘核自旋为 1，所以左边总自旋$S=1$. 由于反应前的两个粒子处于S轨道，即$L=0$，所以反应前左边的总角动量量子数$J=1$. 由角动量守恒这也是反应后右边的总角动量量子数.

中子自旋为$\frac{1}{2}$，所以右边的总自旋是 1 或 0. 我们可以断定$S=0$不可能，因为这是反对称的自旋态要求配上对称的空间波函数，即L为偶数，而这将导致偶数J值，总角动量将会不守恒. $S=1$的自旋态是对称的要求反对称的空间波函数即L为奇数，当$S=1$，$J=1$时，唯一可能的奇数值是$L=1$.

(2) 处于$L=0$态的质子和中子构成的氘核具有正宇称，所以氘核具有正宇称(质子与中子的内禀宇称都是正的.)因为π^-和氘核反应前处于$L=0$态，所以左边的总宇称与π^-的内禀宇称相同. 右边两个中子处于$L=1$态，它的宇称是负的. 反应是在强核力作用下发生的，强相互作用下宇称守恒，所以π^-的内禀宇称为负.

9.13 无限深方势阱中几个电子的平均能量

题 9.13 一维无限深方势阱中含有 3 个电子. 在温度$T=0\text{K}$，而电子间 Coulomb 能可忽略的近似下，3 个电子的平均能量$E=12.4\text{eV}$. 问在同样温度和近似下，在阱中的 4 个电子的平均能量是多少？

解 能级$E_n=n^2E_1$. 由 Pauli 不相容原理和能量最低原理. 对阱中的 3 个电子，能级

E_1上有2个电子，能级E_2上有1个电子. 所以

$$12.4\times 3 = 2E_1 + 4E_1, \quad E_1 = 6.2\text{eV}.$$

对4个电子情形，E_1和E_2上各有2个电子. 故4个电子的平均能量为

$$E = \frac{1}{4}(2E_1 + 2E_2) = \frac{5}{2}E_1 = 15.5\text{eV}$$

9.14 两个在有心势阱中运动的电子

题 9.14 考虑两个在有心势阱中运动的电子，阱中只存在三个单粒子态ψ_1，ψ_2和ψ_3. (1) 写出这两个电子系统所有可能的波函数. (2) 现设两电子间存在如下相互作用：$\delta H = V^1(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = V^1(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_1)$，证明下列矩阵元的表达式是正确的.

$$\langle\psi_{13}|\delta H|\psi_{12}\rangle = \langle\psi_3(\boldsymbol{r}_1)\psi_1(\boldsymbol{r}_2)|V^1(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)|\psi_2(\boldsymbol{r}_1)\psi_1(\boldsymbol{r}_2)\rangle$$

$$-\langle\psi_1(\boldsymbol{r}_1)\psi_3(\boldsymbol{r}_2)|V^1(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)|\psi_2(\boldsymbol{r}_1)\psi_1(\boldsymbol{r}_2)\rangle$$

解 (1) Fermi 子系统波函数应为交换反对称的，故此系统所有可能的波函数为

$$\psi_{12} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(\boldsymbol{r}_1)\psi_2(\boldsymbol{r}_2) - \psi_1(\boldsymbol{r}_2)\psi_2(\boldsymbol{r}_1)]$$

$$\psi_{13} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(\boldsymbol{r}_1)\psi_3(\boldsymbol{r}_2) - \psi_1(\boldsymbol{r}_2)\psi_3(\boldsymbol{r}_1)]$$

$$\psi_{23} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_2(\boldsymbol{r}_1)\psi_3(\boldsymbol{r}_2) - \psi_2(\boldsymbol{r}_2)\psi_3(\boldsymbol{r}_1)]$$

(2)

$$\langle\psi_{13}|\delta H|\psi_{12}\rangle = \frac{1}{2}\langle\psi_1(\boldsymbol{r}_1)\psi_3(\boldsymbol{r}_2)|\delta H|\psi_1(\boldsymbol{r}_1)\psi_2(\boldsymbol{r}_2)\rangle - \frac{1}{2}\langle\psi_1(\boldsymbol{r}_1)\psi_3(\boldsymbol{r}_2)|\delta H|\psi_2(\boldsymbol{r}_1)\psi_1(\boldsymbol{r}_2)\rangle$$

$$-\frac{1}{2}\langle\psi_1(\boldsymbol{r}_2)\psi_3(\boldsymbol{r}_1)|\delta H|\psi_1(\boldsymbol{r}_1)\psi_2(\boldsymbol{r}_2)\rangle + \frac{1}{2}\langle\psi_1(\boldsymbol{r}_2)\psi_3(\boldsymbol{r}_1)|\delta H|\psi_2(\boldsymbol{r}_1)\psi_1(\boldsymbol{r}_2)\rangle$$

在第一项和第三项中交换$\boldsymbol{r}_1$和$\boldsymbol{r}_2$，再与第二、四项合并，即得证.

9.15 两个全同 Fermi 子处于一维无限深势阱中时的三个最低能量

题 9.15 两个质量为m自旋为$\frac{1}{2}$的全同非相对论 Fermi 子处于一个一维方势阱中. 阱的宽度为L, 在阱外V是无穷大排斥的. Fermi 子间有着相互作用势$V(x_1 - x_2)$，这可作为微扰. 用单粒子态和自旋态给出三个最低能态. 以一阶微扰论计算第二、三个最低能态的能量. 将你的结果保留在积分式，忽略自旋相关力.

解 势能可写成

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x \in [0, L] \\ \infty, & \text{其他} \end{cases}$$

立即可写出体系的单粒子空间波函数为

$$\psi_n(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{L}}\sin\dfrac{n\pi x}{L}, & x\in[0,\ L]\\ 0, & 其他\end{cases}$$

单粒子自旋波函数为$\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$.

由于不考虑自旋相关力，两粒子波函数可分解成空间部分和自旋部分的乘积.自旋波函数取为$S^2=(S_1+S_2)^2$和$S_z=S_{1z}+S_{2z}$的本征态

$$\chi_J(M)=\chi_{JM}$$

$$S^2\chi_{JM}=J(J+1)\chi_{JM}$$

$$S_z\chi_{JM}=M\chi_{JM}$$

$J=0$为自旋单态，对粒子交换反对称. $J=1$为自旋三重态，对粒子交换对称.

空间波函数也可进行对称化和反称化

$$\psi_{nm}^A(x_1,x_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_n(x_1)\psi_m(x_2)-\psi_n(x_2)\psi_m(x_1)]$$

$$\psi_{nm}^S(x_1,x_2)=\begin{cases}\dfrac{1}{\sqrt{2}}[\psi_n(x_1)\psi_m(x_2)-\psi_n(x_2)\psi_m(x_1)], & n\neq m\\ \psi_n(x_1)\psi_n(x_2), & n=m\end{cases}$$

所以总体波函数可以写成

$$\psi_{nm}^A(x_1,x_2)\chi_{JM}^S$$

$$\psi_{nm}^S(x_1,x_2)\chi_{JM}^A$$

它们所对应的能量为

$$E=\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(n^2+m^2),\qquad n,\ m=1,\ 2,\ \cdots$$

(i) 基态. $n=m=1$.

空间波函数对称，自旋必是单态

$$\psi_0=\psi_{11}^S(x_1,x_2)\chi_{00}$$

(ii) 第一激发态. $n=1$， $m=2$.

$$\psi_1=\begin{cases}\psi_{12}^A(x_1,x_2)\chi_{1M}, & M=0,\ \pm1\\ \psi_{12}^S(x_1,x_2)\chi_{00}\end{cases}$$

四重简并.

(iii) 第二激发态. $n=2$， $m=2$.

空间波函数对称，自旋必是单态

$$\psi_2=\psi_{22}^S(x_1,x_2)\chi_{00}$$

非简并.

由于微扰 Hamilton 量与自旋无关，因此，第一激发态的微扰计算可视为非简并情况.

$$\Delta E_1^A=\int dx_1dx_2\left|\psi_{12}^A(x_1,x_2)\right|^2V(x_1-x_2)$$

$$\Delta E_1^S=\int dx_1dx_2\left|\psi_{12}^S(x_1,x_2)\right|^2V(x_1-x_2)$$

$$\Delta E_2^S=\int dx_1dx_2\left|\psi_{22}^S(x_1,x_2)\right|^2V(x_1-x_2)$$

9.16 一维盒子中相互作用势为 $a\delta(x_1-x_2)$ 的两个无自旋粒子

题 9.16 宽为 L 的一维盒子内有两个质量均为 m 的无自旋粒子，其相互作用势能为 $V(x_1,x_2)=a\delta(x_1-x_2)$. 计算基态能量精确到 a 的一次项.

解 若不考虑 δ 位势

$$V(x_1,x_2)=\begin{cases}0, & 0\leqslant x_1,\ x_2\leqslant L\\ \infty, & \text{其他}\end{cases}$$

$$H_0=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx_1^2}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx_2^2}+V(x_1,x_2)$$

应用无限深势阱的结果

$$\psi_{nl}(x_1,x_2)=\psi_n(x_1)\psi_l(x_2)=\frac{2}{L}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x_1\right)\sin\left(\frac{l\pi}{L}x_2\right)$$

$$E_{n,l}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(n^2+l^2),\qquad n,l=1,\ 2,\ \cdots$$

对基态， $n=l=1$

$$E_{11}=\frac{\hbar^2\pi^2}{mL^2}$$

现加上 $H'=a\delta(x_1-x_2)$ ，基态能量的微扰修正为

$$\begin{aligned}\bar{H}'&=\langle 11|H|11\rangle\\ &=\int_0^L\int_0^L dx_1dx_2a\delta(x_1-x_2)\sin^2\left(\frac{\pi}{L}x_1\right)\sin^2\left(\frac{\pi}{L}x_2\right)\left(\frac{2}{L}\right)^2\\ &=a\left(\frac{2}{L}\right)^2\int_0^L dx_1\sin^4\left(\frac{\pi}{L}x_1\right)=\frac{3a}{2L}\end{aligned}$$

基态能量为

$$E_{1,1}'=E_{1,1}+\bar{H}'=\frac{\hbar^2\pi^2}{mL^2}+\frac{3a}{2L}$$

9.17 相互作用为 $H=A(\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2-3S_{1x}S_{2x})$ 的两个固定电子

题 9.17 固定在 z 轴上的两个电子间存在一个磁偶极-偶极相互作用能

$$H=A(\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2-3S_{1z}S_{2z})$$

$S_i = \frac{1}{2}\sigma_i$ ，σ_i 为 Pauli 自旋矩阵，A 为常数(令 $\hbar = 1$).

(1) 用总自旋算子 $S = S_1 + S_2$ 表示 H/A . (2) 求 H/A 的本征值和简并度(统计权重).

解 (1)

$$S^2 = (S_1 + S_2)^2 = \frac{3}{2} + 2S_1 \cdot S_2$$

$$S_z^2 = (S_{1z} + S_{2z})^2 = \frac{1}{2} + 2S_{1z}S_{2z}$$

$$\frac{H}{A} = S_1 \cdot S_2 - 3S_{1z}S_{2z} = \frac{1}{2}\left(S^2 - 3S_z^2\right)$$

(2) 对于 S^2 、S_z 的共同本征态 $|S,M\rangle$

$$\frac{H}{A}|S,M\rangle = \frac{1}{2}\left[S(S+1) - 3M^2\right]|S,M\rangle$$

这就是本征值方程. 同时可看出对于 $m \neq 0$ 的态，能级是二重简并的，简并度为 2.

$\|S,M\rangle$	E/A	$D(E/A)$
$\|0, 0\rangle$	0	1
$\|1, \pm 1\rangle$	$-\frac{1}{2}$	2
$\|1, 0\rangle$	1	1

这里 E/A 为 H/A 的本征值，$D(E/A)$ 为能级的简并度.

9.18 两全同 Fermi 子形成的系统

题 9.18 (1) 两 Fermi 子形成的系统有一波函数 $\psi(1,2)$. 若它们是全同的，$\psi(1,2)$ 必须满足什么条件? (2) 这怎样意味着 Pauli 不相容原理(在一原子中无两个电子有全同的量子数)的基本陈述. (3) Mg 的第一激发态的价电子组态为 (3s, 3p) . 在 L-S 耦合的极限下，什么样的 L 和 S 值是可能的? 它们的波函数空间部分的形式是什么(当单粒子波函数分别为 $\phi_s(r)$ 和 $\phi_p(r)$ 时) ? 哪一个具有最低能量? 为什么?

解 (1) $\psi(1,2)$ 必须满足对粒子交换反对称

$$\psi(2,1) = -\psi(1,2)$$

(2) 在一原子中，若有两电子具有完全相同的量子数，则必有 $\psi(1,2) = \psi(2,1)$ ，于是由(1)得

$$\psi(1,2) = 0$$

也就是说这样的态是不存在的.

(3) 电子组态 (3s, 3p) ，即

$$l_1 = 0, \quad l_2 = 1, \quad s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$$

所以

$$L = 1, \qquad S = 0, 1$$

$$\psi_S^L(1,2)=\phi_S^L(1,2)\chi_S^L(1,2)$$

式中

$$\begin{cases}\phi_0^1(1,2)=\dfrac{1}{\sqrt{2}}(\phi_s(r_1)\phi_p(r_2)+\phi_s(r_2)\phi_p(r_1))=\dfrac{1}{\sqrt{2}}(1+P_{12})\phi_s(r_1)\phi_p(r_2)\\ \phi_1^1(1,2)=\dfrac{1}{\sqrt{2}}(1-P_{12})\phi_s(r_1)\phi_p(r_2)\end{cases}$$

最低能量态是态$\psi_1^1(1,2)$，即$S=1$的态. 因为$S=1$的态空间部分对交换$1\leftrightarrow 2$是反对称的，所以两电子靠近的概率较小，两电子间的Coulomb排斥能较小，从而总能量较低.

9.19 两个粒子在同一谐振子势中以弹性力相互作用

题 9.19 两个质量均为 m 的粒子束缚于一个一维谐振子势$V=\dfrac{1}{2}Kx^2$中，并且通过一个简谐吸引力$F_{12}=-K(x_1-x_2)$相互作用(假如需要，可取K是小量). (1) 该系统三个最低能量态的能量是多少? (2) 若粒子是全同无自旋的，(1)中哪些态是被允许的? (3) 若粒子是全同的，且自旋为1/2，(1)中每个态总自旋是什么?

解 系统的Hamilton量为

$$H=\frac{-\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right)+\frac{1}{2}k(x_1^2+x_2^2)+\frac{K}{2}(x_1-x_2)^2$$

设$\xi=\dfrac{1}{\sqrt{2}}(x_1+x_2)$，$\eta=\dfrac{1}{\sqrt{2}}(x_1-x_2)$，则

$$\begin{aligned}H&=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}\right)+\frac{1}{2}k(\xi^2+\eta^2)+K\eta^2\\&=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}\right)+\frac{1}{2}k\xi^2+\frac{1}{2}(k+2K)\eta^2\end{aligned}$$

故系统能量本征态为

$$E_{nm}=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_1+\left(m+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_2$$

式中，$\omega_1=\sqrt{\dfrac{k}{m}}$；$\omega_2=\sqrt{\dfrac{k+2K}{m}}$；$n,m=0,1,2,\cdots$. 对应于本征态

$$|nm\rangle=\psi_{nm}=\varphi_n^{(k)}(\xi)\varphi_m^{(k+2K)}(\eta)$$

式中，$\varphi_n^{(k)}$是对应于弹性常数为K的谐振子的第n个本征态.

(1) 系统的三个最低能量态的能量分别为

$$E_{00}=\frac{1}{2}\hbar(\omega_1+\omega_2)$$

$$E_{10}=\frac{1}{2}\hbar(\omega_1+\omega_2)+\hbar\omega_1$$

$$E_{01}=\frac{1}{2}\hbar(\omega_1+\omega_2)+\hbar\omega_2$$

假定 K 相对 k 来说较小，否则应是 E_{20}.

(2) 若粒子是全同无自旋的故为 Bose 子，由波函数对两粒子交换对称性得到(1)中的态 $|00\rangle$，$|10\rangle$ 被容许的，而态 $|01\rangle$ 不容许.

(3) 若粒子是自旋 1/2 的全同粒子，由总波函数对两粒子交换反对称得到总自旋 S 在(1)中各态值如下

$$|00\rangle \sim S=0$$

$$|10\rangle \sim S=0$$

$$|01\rangle \sim S=1$$

9.20 两粒子体系的最低总能量、能级简并度和相应的波函数

题 9.20 某个特殊的一维势阱具有下列束缚态单粒子能量本征函数：$\psi_a(x)$，$\psi_b(x)$，$\psi_c(x)$，…，其中 $E_a<E_b<E_c\cdots$. 两个没有相互作用的粒子置于该势阱中. 对下列(1), (2), (3)各种情形写下：两粒子体系可能达到的两个最低总能量值；上述两个能级各自的简并度；与上述能级相应的所有可能的两粒子波函数(用 ψ 表示空间部分，$|S,M_s\rangle$ 表示自旋部分，S 是总自旋.) (1) 两个自旋为 1/2 的可区分粒子. (2) 两个自旋为 1/2 的全同粒子. (3) 两个自旋为 0 的全同粒子.

解 两个粒子之间没有相互作用时，其空间波函数满足的 Schrödinger 方程分别为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+V(x_1)\right]\psi_i(x_1)=E_i\psi_i(x_1)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}+V(x_2)\right]\psi_j(x_2)=E_j\psi_j(x_2), \qquad i,\ j=a,\ b,\ c,\ \cdots$$

以上二式合起来，可得

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}+V(x_1)+V(x_2)\right]\psi_i(x_1)\psi_j(x_2)=(E_i+E_j)\psi_i(x_1)\psi_j(x_2)$$

利用这一性质以及粒子的统计性质等，可得

(1) 对于两个自旋为 1/2 的可区分粒子

总能量　　E_a+E_a

简并度　　4

波函数

$$\begin{cases}\psi_a(x_1)\psi_a(x_2)|00\rangle\\ \psi_a(x_1)\psi_a(x_2)|1m\rangle, \qquad m=0,\ \pm1\end{cases}$$

式中，$|00\rangle$ 与 $|1m\rangle$ 分别为自旋单态与自旋三重态.

总能量　　E_a+E_b

简并度　8

波函数

$$\begin{cases}\psi_a(x_1)\psi_a(x_2)|00\rangle \\ \psi_a(x_1)\psi_a(x_2)|1m\rangle\end{cases},\qquad \begin{cases}\psi_a(x_1)\psi_b(x_2)|00\rangle \\ \psi_a(x_1)\psi_b(x_2)|1m\rangle\end{cases}$$

(2) 对于两个自旋为 1/2 的全同粒子

总能量　E_a+E_a

简并度　1

波函数　$\psi_a(x_1)\psi_a(x_2)|00\rangle$

总能量　E_a+E_b

简并度　4

波函数

$$\begin{cases}\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(x_1)\psi_b(x_2)+\psi_b(x_1)\psi_a(x_2)]|00\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(x_1)\psi_b(x_2)-\psi_b(x_1)\psi_a(x_2)]|1m\rangle\end{cases}$$

(3) 对于两个自旋为 0 的全同粒子

总能量　E_a+E_a

简并度　1

空间波函数　$\psi_a(x_1)\psi_a(x_2)$

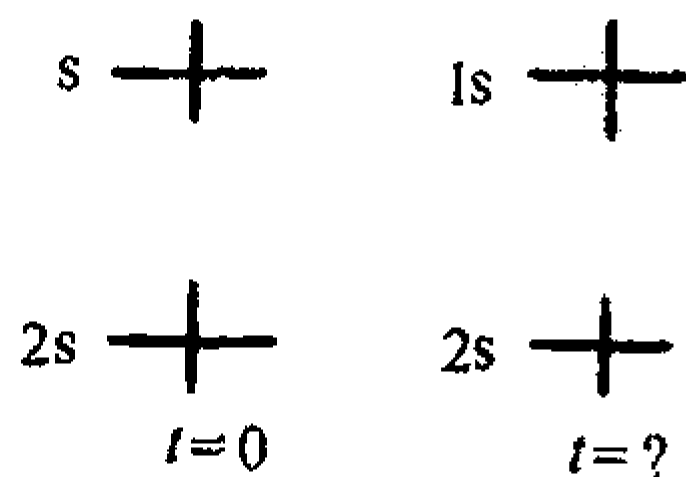
总能量　E_a+E_b

简并度　1

空间波函数　$\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(x_1)\psi_b(x_2)+\psi_b(x_1)\psi_a(x_2)]$

9.21 两个在中心场中运动的电子

题 9.21 两个在中心场中运动的电子. 将电子间的静电作用 $\frac{e^2}{|r_1-r_2|}$ 当作微扰. (1) 对于 1s, 2s 组态求一阶能移(将答案用非微扰量和 $\frac{e^2}{|r_1-r_2|}$ 的矩阵元表示). (2) 对于(1)中的态讨论两粒子波函数的对称性. (3) 假设在 $t=0$ 时，一个电子处于 1s 非微扰态自旋向上，另一电子在 2s 非微扰态自旋向下. 在什么时候态的占据翻转(题图 9.21)?



题图 9.21

解 (1) 两个电子的零级波函数有如下两种形式

$$\begin{cases}\phi_+(r_1,r_2)\chi_{00}(s_{1z},s_{2z}) \\ \phi_-(r_1,r_2)\chi_{1M_s}(s_{1z},s_{2z})\end{cases}$$

式中

$$\phi_\varepsilon = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[u_{1s}(1)v_{2s}(2) + \varepsilon u_{1s}(2)v_{2s}(1)\right], \qquad \varepsilon = \pm 1$$

分别表示归一化的对称与反对称波函数. χ_0 和 χ_1 分别表示自旋单态与三重态. 将 u_{1s} 简记成 1，v_{2s} 态记为 2. ϕ_ε 态记为

$$|\phi_\varepsilon\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1,2\rangle + \varepsilon|2,1\rangle\right)$$

由于微扰 Hamilton 与自旋无关，χ 可不考虑.

$$\begin{aligned}\Delta E_\varepsilon &= \int \mathrm{d}^3 r_1 \mathrm{d}^3 r_2 \phi_\varepsilon^* \frac{e^2}{|r_1 - r_2|}\phi_\varepsilon \\ &= \frac{1}{2}\left(\langle 1,2| + \varepsilon\langle 2,1|\right)\frac{e^2}{|r_1 - r_2|}\left(\langle 1,2| + \varepsilon\langle 2,1|\right) \\ &= \frac{1}{2}\left[\langle 1,2|A|1,\ 2\rangle + \langle 2,1|A|2,\ 1\rangle + \varepsilon\langle 1,2|A|2,\ 1\rangle + \varepsilon\langle 2,1|A|1,\ 2\rangle\right]\end{aligned}$$

式中

$$A = \frac{e^2}{|r_1 - r_2|}$$

$$\Delta E_\varepsilon = K + \varepsilon J$$

式中

$$K = \langle 1,2|A|1,2\rangle = \langle 2,1|A|2,1\rangle \text{ 为直接积分}$$

$$J = \langle 1,2|A|2,1\rangle = \langle 2,1|A|1,2\rangle \text{ 为交换积分}$$

(2) χ_0 单态对自旋交换反对称；χ_1 三重态对自旋交换对称. ϕ_+ 对 r_1，r_2 交换对称；ϕ_- 对 r_1，r_2 交换反对称. 所以总波函数是对交换电子反对称.

(3) 系统的初态为

$$\begin{aligned}\psi(t=0) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1s2s\rangle|\uparrow\downarrow\rangle - |2s1s\rangle|\downarrow\uparrow\rangle\right) \\ &= \frac{1}{2\sqrt{2}}\left[\left(|1,2\rangle + |2,1\rangle\right)\left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right) + \left(|1,2\rangle - |2,1\rangle\right)\left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\right)\right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_+\chi_{00} + \psi_-\chi_{10})\end{aligned}$$

从而，在时刻 t 的波函数为

$$\psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_+\chi_{00}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_+t/\hbar} + \psi_-\chi_{10}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_-t/\hbar}\right)$$

式中，E_+，E_- 分别是 ψ_+，ψ_- 相应的能量.

当 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}E_+t/\hbar}/\mathrm{e}^{\mathrm{i}E_-t/\hbar} = -1$ 时，波函数将为

$$\begin{aligned}\psi(t_n) &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_+t_n/\hbar}\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_+\chi_{00} - \psi_-\chi_{10}) \\ &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_+t_n/\hbar}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|2,1\rangle|\uparrow\downarrow\rangle - |1,2\rangle|\downarrow\uparrow\rangle\right)\end{aligned}$$

自旋翻转了，于是

$$t_n=(2n+1)\pi\frac{\hbar}{E_+-E_-}=\frac{(2n+1)\pi\hbar}{2J},\qquad n=0,\ 1,\ 2,\ \cdots$$

9.22 氢分子的转动能级

题 9.22 (1) 证明宇称算符与轨道角动量算符对易. 球谐函数 $Y_{lm}(\theta,\ \varphi)$ 的宇称量子数是多少? (2) 对于在 $E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$ 态的一维谐振子证明: $\left\langle\Delta x^2\right\rangle_n\left\langle\Delta p^2\right\rangle_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)^2\hbar^2$. (3) 考虑氢分子 H_2 的转动. 它的转动能级是什么? 两个核子的全同如何改变能谱? 在这些能级中能发生什么类型的辐射跃迁? 记住质子是 Fermi 子. (4) 证明 $(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})^2=1$, 式中 $\boldsymbol{n}$ 是任意方向单位矢量, $\boldsymbol{\sigma}$ 是 Pauli 自旋矩阵.

解 (1) 轨道角动量算符为

$$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{P}$$

故而对任意波函数 $f(\boldsymbol{r})$ 有

$$PLf(\boldsymbol{r})=P(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{P})f(\boldsymbol{r})=(-\boldsymbol{r})\times(-\boldsymbol{P})f(-\boldsymbol{r})$$
$$=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{P}f(-\boldsymbol{r})=\boldsymbol{L}Pf(\boldsymbol{r})$$

式中, P 为宇称算符. 于是 P 与 $\boldsymbol{L}$ 对易.

由于

$$Y_{lm}(\theta,\phi)=(-1)^l Y_{lm}(\pi-\theta,\pi+\phi)$$

所以 $Y_{lm}(\theta,\phi)$ 的宇称量子数为 $(-1)^l$.

(2) 对于一维谐振子

$$x=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a+a^\dagger),\qquad p=\mathrm{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(a^\dagger-a)$$

利用

$$a|n\rangle=\sqrt{n}|n-1\rangle,\qquad a^\dagger|n\rangle=\sqrt{n+1}|n+1\rangle$$

可得

$$\langle n|x|n\rangle=0,\qquad \langle n|p|n\rangle=0$$

$$\left\langle n\left|x^2\right|n\right\rangle=\frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1),\qquad \left\langle n\left|p^2\right|n\right\rangle=\frac{m\hbar\omega}{2}(2n+1)$$

所以

$$\left\langle\Delta x^2\right\rangle_n\left\langle\Delta p^2\right\rangle_n=\left\langle x^2\right\rangle_n\left\langle p^2\right\rangle_n=\hbar^2\left(n+\frac{1}{2}\right)^2$$

(3) 由于转动 Hamilton 量为 $H=J^2/2I_0$, 所以氢分子转动能级为

$$E_r=\frac{\hbar^2}{2I_0}K(K+1)$$

式中，$I_0 = MR_0^2$ 是分子绕垂直于两核联线的轴的转动惯量. K 是角动量量子数，$K = 0, 1, \cdots$. 相应的本征态为球谐函数 $Y_{KM_K}(\theta,\phi)$.

由于质子自旋是 $\frac{\hbar}{2}$，于是波函数对两个质子的交换反称，而在两个质子交换下，质心运动波函数及振动波函数不变，而转动波函数改变如下

$$Y_{KM_K}(\theta,\phi) \to Y_{KM_K}(\pi-\theta,\pi+\phi) = (-1)^K Y_{KM_K}(\theta,\phi)$$

K 为偶数时，$(-1)^K Y_{KM_K}(\theta,\phi) = Y_{KM_K}(\theta,\phi)$. 自旋波函数必须反对称态，$\chi_0$ 自旋单态；而当 K 为奇数时，$(-1)^K Y_{KM_K}(\theta,\ \phi) = -Y_{KM_K}(\theta,\ \phi)$. 于是，自旋波函数必须对称，$\chi_1$ 自旋三重态. 前者称为仲氢，后者称为正氢.

由于正氢和仲氢之间不能相互转化，所以转动能级的跃迁有 $\Delta K = 2, 4, 6, \cdots$. 可能发生电四极跃迁.

(4) $$(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})^2 = \left(\sum_i n_i\sigma_i\right)^2 = \sum_{i,j} n_i n_j \sigma_i \sigma_j = \frac{1}{2}\sum_{i,j} n_i n_j \{\sigma_i, \sigma_j\} = \sum_i n_i n_i = 1$$

9.23 一长方盒子中相互作用势为 $V = A\delta(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2)$ 的两个粒子

题 9.23 两个质量为 m 的粒子处于一个边长为 $a>b>c$ 的长方体盒子中，体系处于与下列条件相容的能量最低态. 粒子间的相互作用势为 $V = A\delta(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2)$. 在下列条件中用一阶微扰论计算体系能量. (1) 粒子不全同. (2) 零自旋全同粒子. (3) 自旋平行的自旋 $\frac{1}{2}$ 全同粒子.

解 (1) 非微扰体系可视为两个单粒子体系的直积.

$$\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) = \psi(\boldsymbol{r}_1)\psi(\boldsymbol{r}_2)$$

最低能态为

$$\psi_0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) = \begin{cases} \dfrac{8}{abc}\sin\dfrac{\pi x_1}{a}\sin\dfrac{\pi x_2}{a}\sin\dfrac{\pi y_1}{b}\sin\dfrac{\pi y_2}{b}\cdot\sin\dfrac{\pi z_1}{c}\sin\dfrac{\pi z_2}{c}, & 0<x_i<a,\ 0<y_i<b,\ 0<z_i<c \quad i=1,\ 2 \\ 0, & \text{其他情形} \end{cases}$$

$$E_0 = \frac{\hbar^2\pi^2}{m}\left(\frac{1}{a^2}+\frac{1}{b^2}+\frac{1}{c^2}\right)$$

一阶微扰论给出

$$\begin{aligned}\Delta E &= \int d^3r_1 d^3r_2 \psi_0^*(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) A\delta(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)\psi_0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) \\ &= \int d^3r_1 A|\psi_0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)|^2 = \frac{27A}{8abc}\end{aligned}$$

所以

$$E' = \frac{\hbar^2\pi^2}{m}\left(\frac{1}{a^2}+\frac{1}{b^2}+\frac{1}{c^2}\right) + \frac{27}{8abc}A$$

(2) 此时，要求体系波函数对粒子交换对称. 所以，最低能态为

$$\psi_S(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=\psi_0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)$$

与(1)中的波函数完全一样，一阶修正后的能量为

$$E_S'=\frac{\hbar^2\pi^2}{m}\left(\frac{1}{a^2}+\frac{1}{b^2}+\frac{1}{c^2}\right)+\frac{27}{8abc}A$$

(3) 自旋平行，自旋波函数对称，要求空间波函数反称. 由于$a>b>c$，于是$\frac{1}{a^2}<\frac{1}{b^2}<\frac{1}{c^2}$. 最低能态为

$$\psi_A(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{211}(\boldsymbol{r}_1)\psi_{111}(\boldsymbol{r}_2)-\psi_{211}(\boldsymbol{r}_2)\psi_{111}(\boldsymbol{r}_1)]$$

式中，$\psi_{111}(\boldsymbol{r})$和$\psi_{211}(\boldsymbol{r})$分别是单粒子基态和第一激发态

$$E_{A0}=\frac{\hbar\pi^2}{m}\left(\frac{5}{2a^2}+\frac{1}{b^2}+\frac{1}{c^2}\right)$$

一阶微扰论给出

$$\Delta E=\int d^3\boldsymbol{r}_1d^3\boldsymbol{r}_2\psi_A^*(\boldsymbol{r}_1,\ \boldsymbol{r}_2)A\delta(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)\psi_A(\boldsymbol{r}_1,\ \boldsymbol{r}_2)=0$$

所以

$$E_A'=\frac{\hbar^2\pi^2}{m}\left(\frac{5}{2a^2}+\frac{1}{b^2}+\frac{1}{c^2}\right)$$

9.24 卟啉环分子

题 9.24 卟啉环是叶绿素、血红蛋白及其他重要化合物中出现的一种分子. 该分子性质的某些物理概念可通过将分子视为一个 18 个电子在上面运动的一维环来解释. (环半径$r=4\,\text{Å}$) (1) 写下归一化的单粒子能量本征函数，假设电子间无相互作用. (2) 分子处于基态时，每个能级上各有多少电子? (3) 分子的最低电子激发能是多少? 对应的分子吸收辐射的波长是多少?

解 (1) 电子角坐标为θ，环半径为r

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\cdot\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\psi(\theta)=E\psi(\theta)$$

解得

$$\psi(\theta)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ik\theta}$$

式中，$k^2=\frac{2mr^2E}{\hbar^2}$.

周期性条件为

$$\psi(\theta)=\psi(\theta+2\pi)$$

所以

$$k=0,\ \pm,\ \pm2,\ \cdots$$

$$E=\frac{\hbar^2}{2mr^2}k^2$$

(2) 以 0，1，2，…分别标志能级 E_0，E_1，…则体系基态的电子组态为

$$0^2 1^4 2^4 3^4 4^4$$

(3) 第一激发态的电子组态为

$$0^2 1^4 2^4 3^4 4^3 5^1$$

$$\Delta E=E_5-E_4=9\frac{\hbar^2}{2mr^2}$$

$$\lambda=\frac{ch}{\Delta E}=5791\,\text{Å}$$

这就是对应的吸收波长.

9.25 一维谐振子阱中，以排斥的 δ 函数势相联系的 N 个全同 Fermi 子

题 9.25 一维谐振子阱中有 N 个(N 是个大数)无自旋 Fermi 子，两两之间有一排斥的 δ 函数势

$$V=\frac{k}{2}\sum_{i=1}^{N}x_i^2+\frac{\lambda}{2}\sum_{i\neq j}\delta(x_i-x_j),\qquad k,\ \lambda>0$$

(1) 用归一化的谐振子单粒波函数 $\psi_n(x)$ 表示出三个最低能量的归一化波函数和能量. 这些能级的简并度是多少? (2) 对这些态的每一个计算 $\sum_{i=1}^{n}x_i^2$ 的期待值.

解 (1) 将 δ 函数势当作微扰. 零级体系波函数可用 Slater 波函数写出

$$\psi_{n1\cdots nN}(x_1\cdots x_n)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix}\psi_{n1}(x_1)\psi_{n1}(x_2)\cdots\psi_{n1}(x_N)\\ \psi_{n2}(x_1)\psi_{n2}(x_2)\cdots\psi_{n2}(x_N)\\ \vdots\qquad\vdots\qquad\vdots\\ \psi_{nN}(x_1)\psi_{nN}(x_2)\cdots\psi_{nN}(x_N)\end{vmatrix}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_P\delta_P P\left[\psi_{n1}(x_1)\cdots\psi_{nN}(x_N)\right]$$

由于波函数对 x_i，$x_j(i\neq j)$ 的反称性，可算出 δ 函数势的矩阵元皆为零. 对零级体系无影响.

能级为

$$E_{(n1\cdots nN)}=\langle n_1\cdots n_N|H|n_1\cdots n_N\rangle=\hbar\omega\left(\frac{N}{2}+\sum_{i=1}^{N}n_i\right)$$

式中，$\omega=\sqrt{k/m}$，$n_1\cdots n_N$ 两两皆不相等.

(i) 基态.

$n_1,\cdots,n_N$ 按顺序排列为 $0,1,\cdots,N-1$

$$E_{0,1,\cdots,N-1}=\hbar\omega\left[\frac{N}{2}+\frac{N(N-1)}{2}\right]=\frac{\hbar\omega}{2}N^2$$

波函数为

$$\psi_{0,1,\cdots,N-1}(x_1,\cdots,x_N)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_P \delta_P P\left[\psi_0(x_1)\cdots\psi_{N-1}(x_N)\right].$$

(ii) 第一激发态.

$n_1,\cdots,n_N$ 的顺序排列为 $0,1,\cdots,N-2,N$

$$E_{0,1,\cdots,N-2,N}=\frac{1}{2}\hbar\omega\left(N^2+2\right)$$

波函数为

$$\psi_{0,1,\cdots,N-2,N}(x_1,\cdots,x_N)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_P \delta_P P\left[\psi_0(x_1)\cdots\psi_{N-2}(x_{N-1})\psi_N(x_N)\right]$$

(iii) 第二激发态.

$n_1,\cdots,n_N$ 的排列顺序有两种

$$\begin{cases}0,1,\cdots,N-2,N+1\\ 0,1,\cdots,N-3,N-1,N\end{cases}$$

能级为

$$E_{0,1,\cdots,N-2,N+1}=E_{0;1,\cdots,N-3,N-1,N}=\frac{\hbar\omega}{2}(N^2+4)$$

波函数有两个

$$\begin{cases}\psi_{0,1,\cdots,N-2,N+1}(x_1,\cdots,x_N)=\dfrac{1}{\sqrt{N!}}\sum\limits_P \delta_P P\left[\psi_0(x_1)\cdots\psi_{N-2}(x_{N-1})\psi_{N+1}(x_N)\right]\\ \psi_{0,1,\cdots,N-3,N-1,N}(x_1,\cdots,x_N)=\dfrac{1}{\sqrt{N!}}\sum\limits_P \delta_P P\left[\psi_0(x_1)\cdots\psi_{N-3}(x_{N-2})\psi_{N-1}(x_{N-1})\psi_N(x_N)\right]\end{cases}$$

同时，我们立刻可看出基态，第一激发态是非简并的. 而第二激发态为二重简并的.

(2) 对于定态，有

$$2\langle T\rangle=\left\langle\sum_i x_i\partial_i V(x_1,\cdots,x_N)\right\rangle$$

而

$$\left\langle\sum_k x_k\partial_k\sum_{i\neq j}\frac{\lambda}{2}\delta(x_i-x_j)\right\rangle=0$$

$$\left\langle\sum_{i\neq j}\frac{\lambda}{2}\delta(x_i-x_j)\right\rangle=0$$

所以可得以下两个等式

$$\left\langle\sum_{i=1}^N x_i^2\right\rangle=\frac{2}{m\omega^2}\langle V(x_1,\cdots,x_N)\rangle$$

$$2\langle T\rangle = 2\langle V(x_1,\cdots,x_N)\rangle$$

于是，我们可以得到

$$\left\langle \sum_{i=1}^{N} x_i^2 \right\rangle = \frac{1}{m\omega^2} E$$

$$\begin{cases} \left\langle 0\left|\sum_{i=1}^{N} x_i^2\right|0\right\rangle = \dfrac{\hbar}{2m\omega} N^2 \\ \left\langle 1\left|\sum_{i=1}^{N} x_i^2\right|1\right\rangle = \dfrac{\hbar}{2m\omega}(N^2+2) \\ \left\langle 2\left|\sum_{i=1}^{N} x_i^2\right|2\right\rangle = \left\langle 2'\left|\sum_{i=1}^{N} x_i^2\right|2'\right\rangle = \dfrac{\hbar}{2m\omega}(N^2+4) \end{cases}$$

式中，$|0\rangle$，$|1\rangle$，$|2\rangle$和$|2'\rangle$分别为基态，第一激发态和两个第二激发态.

9.26 HD 分子的两个最低转动能级差

题 9.26 HD 分子的两个最低转动能级差是多少电子伏特？HD(D 是一个氘核)距离是 0.75Å.

解 转动能级为

$$E_J = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1)$$

$$\Delta E_{10} = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1)\bigg|_{J=1} - \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1)\bigg|_{J=0} = \frac{\hbar^2}{I}$$

由于氘核质量m_D近似为氢核的m_p的两倍，故

$$I = \mu r^2 = \frac{2}{3} m_p r^2$$

于是

$$\Delta E_{10} = \frac{\hbar^2}{\frac{2}{3} m_p r^2} = \frac{3}{2}\cdot\frac{(\hbar c)^2}{m_p c^2}\cdot\frac{1}{r^2}$$

$$= \frac{3}{2}\times\frac{(1.97\times 10^{-11}\mathrm{MeV\cdot cm})^2}{938\mathrm{MeV}}\times\frac{1}{(0.75\times 10^{-8}\mathrm{cm})^2}$$

$$= 1.101\times 10^{-2}\mathrm{eV}$$

9.27 氮分子的相邻的转动能谱强度之比

题 9.27 考虑共核分子 N_2^{14}. 利用氮核自旋 $I=1$ 这个事实推导出以下结果：在氮分子

谱中相邻的转动谱线强度之比为2:1.

证明 在绝热近似下N_2的波函数可表示成电子波函数ψ_e、总核自旋波函数ψ_s、振动波函数ψ_0，转动波函数ψ_I的乘积，即

$$\psi=\psi_e\psi_s\psi_0\psi_I$$

对于分子的转动谱，其涉及的能级的波函数中ψ_e，ψ_0是相同的，差别只在ψ_s与ψ_I上，且对于氮核之间的交换，$\psi_e\psi_0$有确定的符号变化(即$\psi_s\psi_0\to\psi_e\psi_0$或者$-\psi_e\psi_0$)由于N核的核自旋为1，是Bose子，故总核自旋$S$可为0，1，2.

对于N核之间交换算符P

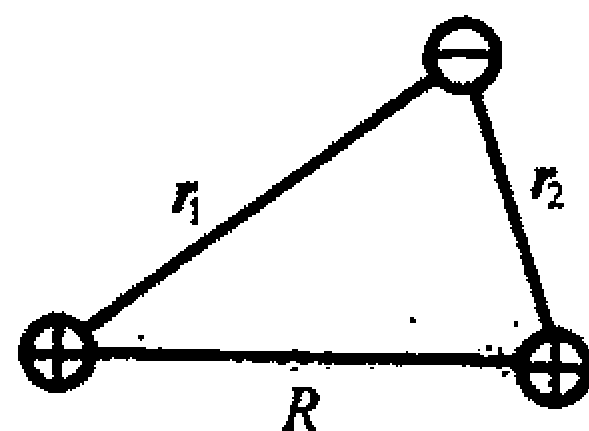
$$P\psi_S=\begin{cases}\psi_S, & S=0,2\\ -\psi_S, & S=1\end{cases}$$

$$P\psi_I=\begin{cases}\psi_I, & I\text{为偶数}\\ -\psi_I, & I\text{为奇数}\end{cases}$$

由Bose-Einstein统计知当两氮核交换时，总波函数应当不变，综上所述可知相邻的转动能级$(\Delta I=1)$必有一为$S=0$或2，另一为$S=1$. 它们的简并度之比为$(2\times2+1+2\times0+1):(2\times1+1)=2:1$. 又对于分子转动谱，其跃迁选择定则为$\Delta J=2$，故相邻两转动谱线必是由$I=$偶数$\to$偶数及$I=$奇数$\to$奇数的跃迁形成的. 由于分子转动能级间距差别与室温下kT相比很小，可以忽略热布居的影响，其相邻谱线强度之比为I为偶数的转动能级简并度与相邻的I为奇数的转动能级简并度之比，故为2:1.

9.28 H_2^+离子

题9.28 (1) 假设H_2^+离子中两质子被固定，间距是1.06Å，画出电子沿质子连线方向的势能图. (2) 画出H_2^+两最低能态的波函数，粗略说明它们与氢原子波函数的关系，哪个波函数对应基态？为什么？(3) 当两氢原子分离无穷远时，两最低态的能级有什么变化？



题图9.28(a)

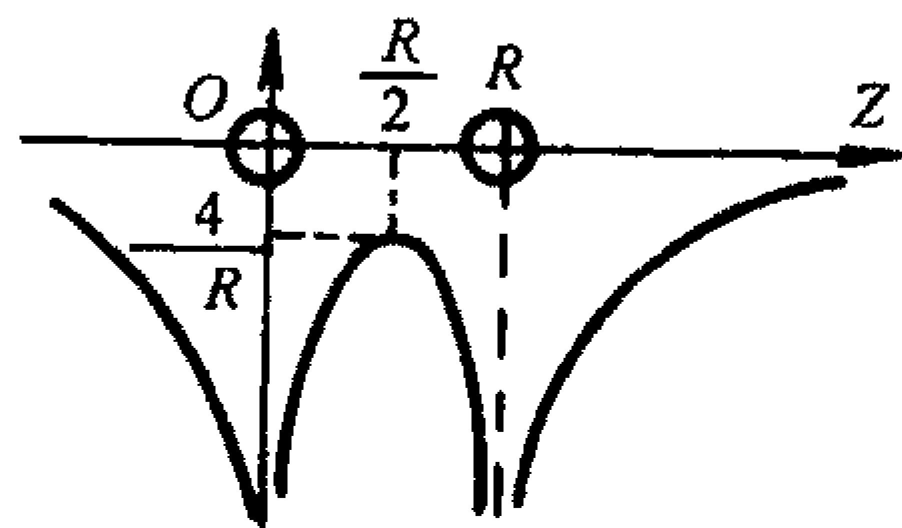
解 (1) 如题图9.28(a)所示，$R=1.06$Å 电子势能为

$$V=-\frac{e^2}{r_1}-\frac{e^2}{r_2}$$

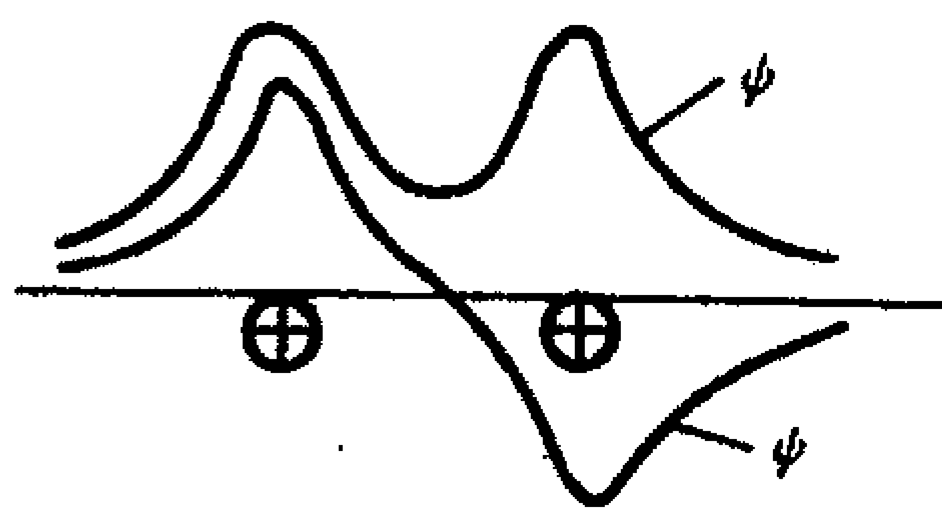
在两质子连线上

$$V=-\frac{e^2}{|x|}-\frac{e^2}{|R-x|}$$

势能曲线(在两质子连线上)如题图9.28(b)所示.



题图9.28(b)



题图9.28(c)

(2) 考虑到两质子全同，则 H_2^+ 的两最低能态的电子波函数为

$$\psi_{\pm} = C_{\pm}\left[\phi(\boldsymbol{r}_1) \pm \phi(\boldsymbol{r}_2)\right]$$

式中，$\phi(\boldsymbol{r})$ 类似于类氢原子的基态波函数

$$\phi(\boldsymbol{r}) = \frac{\lambda^{3/2}}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{a^{3/2}} \mathrm{e}^{-\lambda r/a} = \psi_{100}\big|_{a \to \lambda a}$$

ψ_{100} 为氢原子基态波函数. 两波函数的图如题图 9.28(c)所示. 从图中可以看出，波函数为 ψ_+ 时电子在两核附近的概率较大，因此，基态波函数为 ψ_+.

另外，由 $E_{\pm} = \langle \psi_{\pm} | H | \psi_{\pm} \rangle$ 的计算也可知 $E_+ \langle E_-$ (这里 $H = \dfrac{P^2}{2m} + V$). 在此计算中注意 $\boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{r}_2 = \boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}$，对 $\boldsymbol{r}$ 积分

$$\langle \phi(\boldsymbol{r}_1) | H | \phi(\boldsymbol{r}_1) \rangle = \langle \phi(\boldsymbol{r}_2) | H | \phi(\boldsymbol{r}_2) \rangle$$

$$\langle \phi(\boldsymbol{r}_1) | H | \phi(\boldsymbol{r}_2) \rangle = \langle \phi(\boldsymbol{r}_2) | H | \phi(\boldsymbol{r}_1) \rangle$$

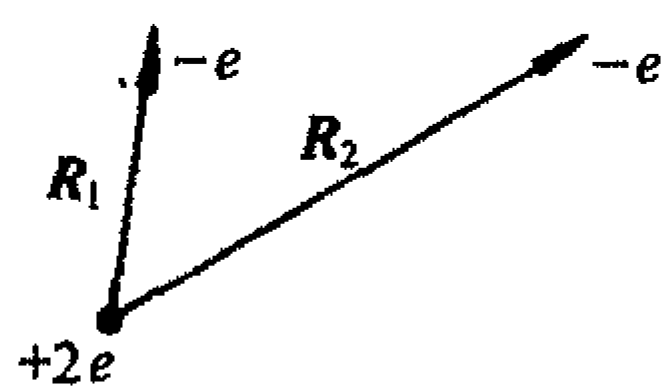
$\langle \phi(\boldsymbol{r}_1) | H | \phi(\boldsymbol{r}_1) \rangle$，$\langle \phi(\boldsymbol{r}_2) | H | \phi(\boldsymbol{r}_2) \rangle$ 均小于零(束缚态).

(3) 当两氢原子分离无穷远时，$\phi(\boldsymbol{r}_1)$ 和 $\phi(\boldsymbol{r}_2)$ 两个束缚态的波包相互重叠得越来越少，因此 $\langle \phi(\boldsymbol{r}_1)) | H | \phi(\boldsymbol{r}_2) \rangle$ 和 $\langle \phi(\boldsymbol{r}_2) | H | \phi(\boldsymbol{r}_1) \rangle \to 0$. 两个最低能级将重合并等于

$$\langle \phi(\boldsymbol{r}_1) | H | \phi(\boldsymbol{r}_1) \rangle\big|_{R \to \infty} = -\frac{\hbar^2 \lambda^2}{2ma^2} + \frac{\lambda}{a}\left(\frac{\lambda \hbar^2}{ma} - e^2\right)$$

9.29 写出氦原子的 Schrödinger 方程及由(1s)′(2s)′电子组态构成的单态和三重态之间的能级分裂

题 9.29 (1) 写出氦原子的 Schrödinger 方程，将核处理为无限重点电荷. (2) He 原子激发态的电子组态是 (1s)′(2s)′，它有单态和三态. 哪个态能量低? 解释之. 用单电子波函数 $\psi_{1s}(\boldsymbol{r})$、$\psi_{2s}(\boldsymbol{r})$ 写出单态和三态之间能量分裂的表达式.



题图 9.29

解 (1) 因为核视为无限重，所以不考虑核的运动；核为点电荷，所以不考虑核内各核子之间的相互作用以及核电荷分布. 如题图 9.29 所示，Schrödinger 方程为

$$\left(\frac{P_1^2}{2m_e} + \frac{P_2^2}{2m_e} - \frac{2e^2}{R_1} - \frac{2e^2}{R_2} + \frac{e^2}{|\boldsymbol{R}_1 - \boldsymbol{R}_2|}\right)\psi(\boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2) = E\psi(\boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2)$$

式中，左边前两项为电子动能；第三、四项对应于核对电子的吸引势；最后一项为两个电子的排斥势. $\boldsymbol{R}_1$、$\boldsymbol{R}_2$ 分别是两个电子以核为原点的位置矢量.

(2) 三态能量低. 电子是 Fermi 子，波函数对于交换两电子总是反对称的. 自旋三态对于两电子交换对称，则空间波函数对于两电子交换反对称，说明两电子靠近的概率比较小，电子之间的排斥能小. 而对于自旋单态，结论正相反. 空间波函数对于交换两电子是对称的，即电子相互靠近的概率大，电子之间的静电排斥能大. 所以三态能量低. 这时，

$$H'=\frac{e^2}{r_{12}},\qquad r_{12}=|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|$$

单态 $\quad {}^1\psi=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{1s}(\boldsymbol{r}_1)\psi_{2s}(\boldsymbol{r}_2)+\psi_{1s}(\boldsymbol{r}_2)\psi_{2s}(\boldsymbol{r}_1)]\chi_{00}$

三态 $\quad {}^3\psi=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{1s}(\boldsymbol{r}_1)\psi_{2s}(\boldsymbol{r}_2)-\psi_{1s}(\boldsymbol{r}_2)\psi_{2s}(\boldsymbol{r}_1)]\chi_{1m},\qquad m=1,\ 0,\ -1$

$$\Delta E=\left\langle {}^1\psi\middle|H'\middle|{}^1\psi\right\rangle-\left\langle {}^3\psi\middle|H'\middle|{}^3\psi\right\rangle$$

注意到$\psi_{ns}^*(\boldsymbol{r})=\psi_{ns}$，则可得

$$\Delta E=2\int\frac{e^2}{r_{12}}\left[\psi_{1s}(\boldsymbol{r}_1)\psi_{2s}(\boldsymbol{r}_1)\psi_{1s}(\boldsymbol{r}_2)\psi_{2s}(\boldsymbol{r}_2)\right]\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2$$

9.30 各种电子组态的${}^{2s+1}L_J$值和简并度

题 9.30 计算下列每一种电子组态的${}^{2s+1}L_J$值. (1) 2s2p，(2) 2p3p，(3) $(2\mathrm{p})^2$，(4) $(3\mathrm{d})^{10}$，(5) $(3\mathrm{d})^9$. 对每一种电子组态，证明每个${}^{2s+1}L_J$组合的态的总数等于组态的简并度.

解 (1) 一个2s电子具有$n=2$，$l=0$，$s=\frac{1}{2}$，具有两个态相应于$m_s=\pm\frac{1}{2}$. 一个2p电子$n=2$，$l=1$，$s=\frac{1}{2}$有6个态它们的$m_l=1,\ 0,\ -1$，$m_s=\pm\frac{1}{2}$(n与单粒子态数无关). 每一个2s态可能和一个2p态结合成一个反对称态，所以电子组态的简并度为$2\times6=12$.

为了获得L，S，J值，首先将轨道角动量与自旋角动量分别相加，由题意知

$$l_1=0,\qquad l_2=1,\qquad s_1=s_2=\frac{1}{2}$$

所以

$$L=1,\qquad S=1\text{或}0$$

由于$L=1$有3个空间态，相应于$M_L=1,\ 0,\ -1$. 它们中的每一个与2个不同的单粒子态相关，其中一个电子$m_l=0$，另一个$m_l=1,\ 0,\ -1$. 对于每一对单粒子态我们可以构造对称与反对称的空间波函数. 前者同反对称的自旋波函数($S=0$)，后者同对称的三重态($S=1$)相乘，所以我们有

$$L=1,\quad S=1\quad\text{和}\quad L=1,\quad S=0$$

一旦我们确定了反对称的L，S组合，则对J没有对称性的限制，由角动量理论我们有

$$L=1,\quad S=1,\quad J=2,\ 1,\ 0$$
$$L=1,\quad S=0,\quad J=1$$

用标准符号可记为

$${}^3\mathrm{p}_2,\quad {}^3\mathrm{p}_1,\quad {}^3\mathrm{p}_0,\quad {}^1\mathrm{p}_1$$

每一个J值有$2J+1$个态，相应于$M_J=J,\ J-1,\ \cdots-J$. 所以总态数为$5+3+1+3=12$，这也正是电子组态(1)的简并度.

讨论 对每个J的$2J+1$值相加的总数总是等于电子组态的简并度，这是因为每一个

L, S, J, M_J 态(称耦合表象)都是具有 m_{l_1}, m_{l_2}, m_{s_1}, m_{s_2} 的单粒子态(无耦合表象)的线性组合，反之亦然. 所以这两类态具有相同的数目，这种情况是两个角动量相加的推广. 这一结果对于检查是否所有的 J 值都考虑到否是很有用的.

(2) 对于组态 2p3p，每个电子都可以处于 6 个态之一，2p 的 6 个态中每一个都可以和 3p 的 6 个态之一组成反对称态，故简并度为 $6\times6=36$. 虽然有些组合两个电子具有相同的 m_l 与 m_s，但电子仍不是处于相同的态，因为 n 值不同.

因为 $l_1=l_2=1$，所以 $L=2, 1, 0$. 另外处于不同壳层的两个电子的单粒子态总可以构成对称与反对称的空间波函数，所以任何 L 值可以和所有的 S 值结合构成总的反对称波函数. 可能的 L 与 S 的结合构成的 J 值列在下表中

L	S	J	$2J+1$	$2J+1$ 的总和
2	1	3, 2, 1	7, 5, 3	15
1	1	2, 1, 0	5, 3, 1	9
0	1	1	3	3
2	0	2	5	5
1	0	1	3	3
0	0	0	1	1
				总和　36

这些态是

$$^3d_3,\ ^3d_2,\ ^3d_1,\ ^3p_2,\ ^3p_1,\ ^3p_0,\ ^3s_1,\ ^1d_2,\ ^1p_1,\ ^1s_0$$

(3) 一个 p 电子有 6 个态，但两个电子必须处于不同态，所以只有 6×5 种直积态. 再由它们构成反对称的波函数，所以由两个处于同壳的 p 电子的组态的简并度为 $\frac{1}{2}\times6\times5=15$.

同(2)，可能的 L 值是 2，1，0. 但两个电子处于同一壳层，对于给定的 L 不能构成任意对称性的空间波函数. 空间态的对称性由 L 确定，同样自旋波函数的对称性由 S 确定. 为了总波函数是反对称的 L 与 S 的组合见下表

L	S	J	$2J+1$	$2J+1$ 的和
2	0	2	5	5
1	1	2, 1, 0	5, 3, 1	9
0	0	0	1	1
				总和　15

这些态是 $^1d_2$　$^3p_2$　$^3p_1$　$^3p_0$　$^1s_0$.

(4) d 壳相应于 $L=2$，有 5 个 m_L 值，乘上 2 个自旋态，共有 10 个态. 这样$(3d)^{10}$表示一个满壳层，它是非简并态，态只能是 $^1s_0$. 这是一个一般的结论，这是因为每一个电子必须有不同的一对 m_l，m_s 值，在满壳层所有的 m_l 值(从 l 到 $-l$)都出现两次(相应两个 m_s 值)，所以它们的和为零. 类似所有电子的 m_s 之和也为零. 这样结果态的量子数 M_L，M_S都为零，

导致

$$L = S = 0$$

因而 $J = 0$.

讨论 满壳层的电子态 $L = S = J = 0$，这是一个很有用的结果，这意味着为了计算一个电子组态的 L、S、J 值，我们可以不去考虑所有填满的壳层中的电子，尽管它们可能是电子组态中的大多数. 我们只需要考虑那些未填满的壳层上的少数电子即可.

(5) 这是一个满壳层中少一个电子的电子组态. 因为满壳层电子组态的轨道角动量和自旋角动量都为零，所以当一个电子从满壳层中去掉后，剩下电子的角动量的各分量等于去掉的电子的角动量分量的负值，也就是剩余电子的 L，S，J 值与壳上只有一个电子时相同. 所以 $(3d)^9$ 简并度为 10，它的 L、S、J 值分别为

$$L=2, \quad S=\frac{1}{2}, \quad J=\frac{5}{2}, \frac{3}{2}$$

相应的态是 $^2d_{5/2}$，$^2d_{3/2}$.

9.31 氮原子基态的电子组态

题 9.31 氮原子基态的电子组态是 $(1s)^2(2s)^2(2p)^3$，试问：

(1) 此电子组态的简并度；

(2) 列出所允许的 2p 壳上的电子的单电子态的乘积态(按 M_L 减少的顺序)；

(3) 此电子组态可能的 $^{2s+1}L_J$ 值是什么？

(4) 哪一个具有最低能量？

解 (1) 1s，2s 层已满可以不考虑. 对 2p 壳层的 3 个电子有 6 个单粒子态，每个电子必须处于不同的态，所以简并度等于从 6 个态中任意选出 3 个的方法的数目，即

$$\frac{6!}{3!3!} = 20$$

(2) 20 个乘积态列在下表中，乘积中的数字是 m_l 值($\bar{1}$ 表示−1)，α，β 表示 $m_s = \frac{1}{2}$，和 $m_s = -\frac{1}{2}$. 例如，第一行中的 $|\alpha 0\alpha|\beta$ 表示三个单粒子态

单粒子态的乘积	M_L	M_S	态数	$L=2$ $S=1/2$	$L=1$ $S=1/2$	$L=0$ $S=3/2$
$\|\alpha 0\alpha\|\beta$	2	$\frac{1}{2}$	1	√		
$\|\beta 0\beta\|\alpha$	2	$-\frac{1}{2}$	1	√		
$\|\alpha 0\alpha 0\beta$ $\quad \|\alpha\bar{1}\alpha\|\beta$	1	$\frac{1}{2}$	2	√	√	
$\|\beta 0\beta 0\alpha$ $\quad \|\beta\bar{1}\beta\|\alpha$	1	$-\frac{1}{2}$	2	√	√	
$\|\alpha 0\alpha\bar{1}\alpha$	0	$\frac{3}{2}$	1			√

$\lvert\alpha 0\alpha\bar{1}\beta$　$\lvert\alpha\bar{1}\alpha 0\beta$　$0\alpha\bar{1}\alpha\lvert\beta$	0	$\frac{1}{2}$	3	√	√	√
$\lvert\beta 0\beta\bar{1}\alpha$　$\lvert\beta\bar{1}\beta 0\alpha$　$0\beta\bar{1}\beta\lvert\alpha$	0	$-\frac{1}{2}$	3	√	√	√
$\lvert\beta 0\beta\bar{1}\beta$	0	$-\frac{3}{2}$	1			√
$\bar{1}\alpha 0\alpha 0\beta$　$\bar{1}\alpha\lvert\alpha\bar{1}\beta$	-1	$\frac{1}{2}$	2	√	√	
$\bar{1}\beta 0\beta 0\alpha$　$\bar{1}\beta\lvert\beta\bar{1}\alpha$	-1	$-\frac{1}{2}$	2	√	√	
$\bar{1}\alpha 0\alpha\bar{1}\beta$	-2	$\frac{1}{2}$	1	√		
$\bar{1}\beta 0\beta\bar{1}\alpha$	-2	$-\frac{1}{2}$	1	√		
	总态数　20					

$$m_l=1,\ m_s=\frac{1}{2};\qquad m_l=0,\ m_s=\frac{1}{2};\qquad m_l=1,\ m_s=-\frac{1}{2}$$

对每一个乘积态 M_L 是 3 个 m_l 的和，同样 M_S 是 3 个 m_s 之和.

(3) 同样存在着 20 个态，它们由不同的量子数 L、S、M_L、M_S 标志. 它们是 20 个乘积态的线性组合，并且对于任一对电子交换具有交换反对称性. 对于同一壳层只有两个电子的情况(题(3))下，反对称性要求的满足可通过对称性的空间波函数与反对称性的自旋波函数相乘或者反对称空间波函数和对称自旋空间波函数相乘来达到. 但是当价壳中的电子超过两个，问题就要复杂些，因为并非一定能将反对称态写成空间波函数与自旋波函数的乘积. 为此我们首先用单粒子态乘积态构成三粒子反对称的态. 方法是若乘积态 $\psi(1,2,3)=u_a(1)u_b(2)u_c(3)$，表示 1 粒子处于单粒子态 u_a，2 粒子处于 u_b，3 粒子处于 u_c 态，则三粒子反对称态可由此乘积态构成，为

$$\psi_A(1,2,3)=\frac{1}{\sqrt{3!}}\{[\psi(1,2,3)+\psi(2,3,1)+\psi(3,1,2)]-[\psi(2,1,3)+\psi(1,3,2)+\psi(3,2,1)]\} \quad (1)$$

如此构成的态与 $\psi(1,2,3)$ 具有相同的 M_L 与 M_S 值. 然后再用上表中同一行中的每一个乘积态分别构成的反对称三粒子态再进行线性组合成为具有确定的 L、S、M_L、M_s 的反对称态. 组合关系确定了 L、S 的可能值. 上表中的符号"√"表示相应的 L 与 S 值(每一列)是由"√"号同行的乘积态线性组合而成的. 例如，第三行有两个乘积态，$\lvert\alpha 0\alpha 0\beta$ 和 $\lvert\alpha\bar{1}\alpha\rvert\beta$ 由式(1)可构成两个三粒子反对称态. 由于相应的 $M_L=1$，$M_S=\frac{1}{2}$，所以用这两个三粒子反对称态经过不同的线性组合又可以构成 $L=2$, $S=\frac{1}{2}$ 和 $L=1$, $S=\frac{1}{2}$ 两个态，如表中"√"号所表示.

每一对 L、S 值导致 J 值(从 $L+S$，$-\lvert L-S\rvert$)，在下表中列出了所有的 L、S、J 值，相应的态为

$${}^2d_{5/2},\ {}^2d_{3/2},\ {}^2p_{3/2},\ {}^2p_{1/2},\ {}^4s_{3/2}$$

L	S	J	$2J+1$	$2J+1$ 的和
2	$\frac{1}{2}$	$\frac{5}{2}, \frac{3}{2}$	6, 4	10
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	4, 2	6
0	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	4	4
			总和	20

(4) 最低能量的态由 Hund 定则决定，第一条定则给出 $S=\frac{3}{2}$，所以基态是 $^4s_{3/2}$.

附录 Hund 定则是用来确定 LS 耦合下基态的 L, S, J 值的：① 在基态中 S 值具有最大值；② L 值具有最大值；③ 当某壳层电子数少于半满时，$J=|L-S|$；当电子数大于半满时 $J=L+S$，当电子数正好是满壳层电子数一半时，$L=0$，$J=S$.

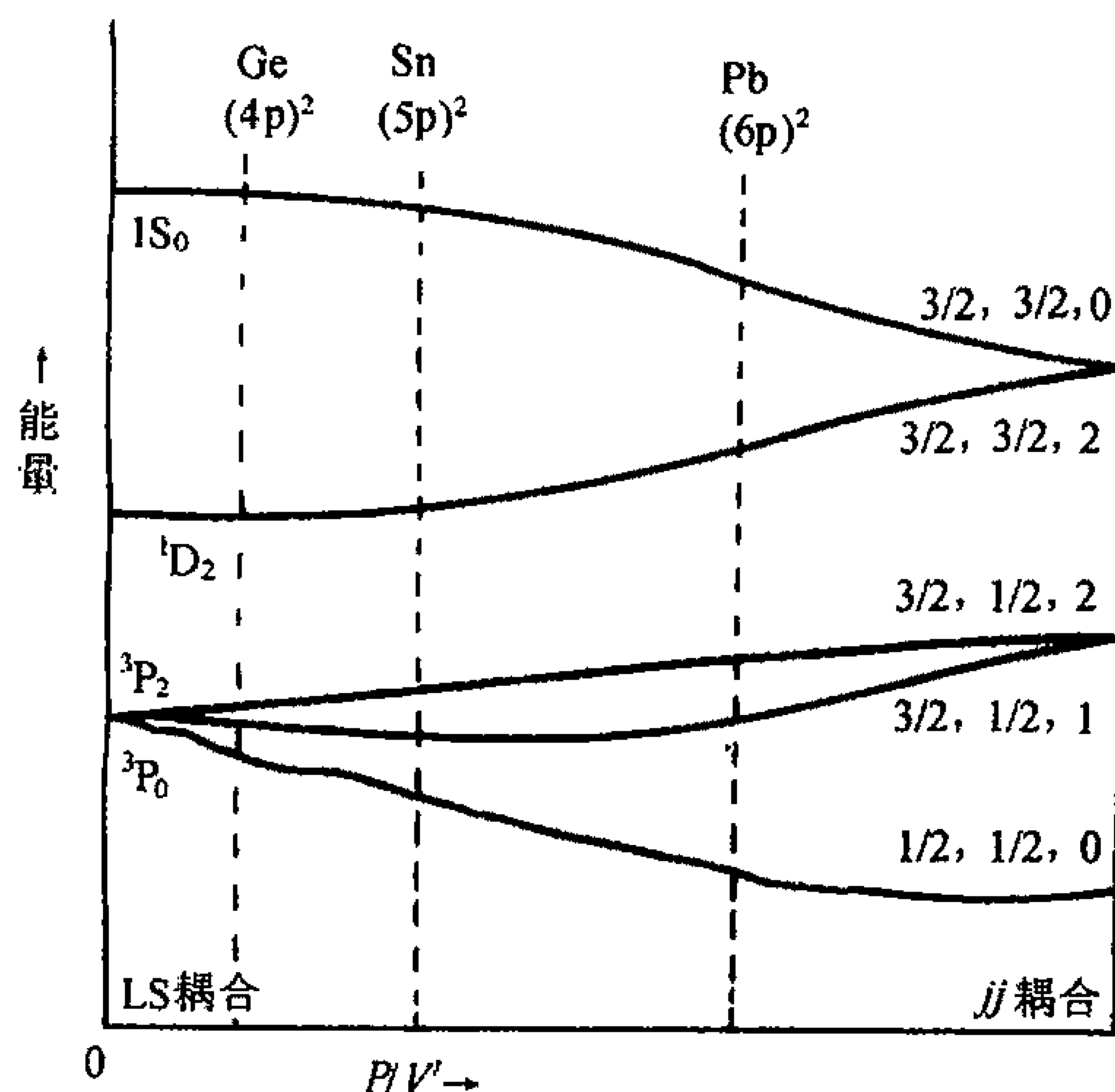
9.32 服从 jj 耦合的铅原子在 6p 壳中的两个电子可能的 j_1, j_2, J 值

题 9.32 铅原子服从 jj 耦合. 铅原子基态在 6p 壳中有两个电子. 对铅原子的这一电子组态，给出可能的 j_1, j_2, J 值(磁相互作用大于静电相互作用).

解 因为铅原子服从 jj 耦合(即 $j_1=L_1+S_1$ 为第一个电子的总角动量，$j_2=L_2+S_2$ 为第二个电子的总角动量在原子中是守恒的)单电子的 $j=L+S$ 为好量子数，对于一个 p 壳的电子，$j=\frac{3}{2}$ 和 $\frac{1}{2}$. 又对于 $j_1=j_2=\frac{3}{2}$ 时，两个电子的 $J=3, 2, 1, 0$. 但是 $J=3$ 和 1 的波函数是交换对称的故被排除. 类似对于 $j_1=j_2=\frac{1}{2}$ 而言，$J=1, 0$，而 $J=1$ 的波函数是对称的，故舍去. 对于 $j_1=\frac{3}{2}$，$j_2=\frac{1}{2}$，$J=2, 1$ 的情况，因为 $j_1\neq j_2$，所以我们可以对所有的 J 值构成反对称波函数，因而都是允许的. 在下表中列出可能的 j_1、j_2、J 值.

j_1	j_2	J	$2J+1$	$2J+1$ 的和
$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	2, 0	5, 1	6
$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	2, 1	5, 3	8
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	1	1
			总和	15

讨论 对$(np)^2$电子组态，上题结果给出在LS耦合下的L，S，J值；本题给出了在jj耦合下的j_1，j_2，J值. 在下面题图 9.31 中显示了$(np)^2$电子组态的能量如何随着P/V'(原子中电子受到的磁力和剩余的电力之比)的变化而变化.



题图 9.31

当$P \ll V'$时，图中以锗为例子说明；$P \sim V'$的时候以锡为例子，这时的态一般来说处于不同的S、L的态的混合，或者不同的j_1，j_2的态的混合；当$P \gg V'$时(jj耦合)，这时态仍然是S、L的组合态，但趋向于具有确定的j_1，j_2值，其中铅就是一例. 值得注意的是在所有情况下，J都是好量子数.

9.33 在热平衡混合物中的氢分子

题 9.33 在氢分子的 ortho form 中两个核的自旋波函数是对称的；在 para form 中是反对称的. 分子内部运动可以表示为刚性转子的运动，本征波函数是球谐函数，相应的本征能量是$l(l+1)\hbar^2/2I$，这里I是分子关于通过它们的质心而且垂直于两核连线的转动轴的转动惯量. (1) 证明当温度为T时，轻氢的热平衡混合物中 para 分子数n_p与 ortho 分子数n_o之比是

$$\frac{n_p}{n_o}=\frac{1}{3}\cdot\frac{\sum\limits_{l=\text{偶}}(2l+1)e^{-l(l+1)x}}{\sum\limits_{l=\text{奇}}(2l+1)e^{-l(l+1)x}}$$

其中

$$x=\frac{\hbar^2}{2I}\cdot\frac{1}{k_BT}$$

k_B是 Boltzmann 常量. (2) 在温度 20.0K 时，轻氢中含有 99.83%的 para form. 计算分子中

两核的距离. (3) 假设在轻氢与重氢分子中两核距离是相同的，计算在同样温度下重氢的平衡混合物中 ortho 分子占的百分比.

解 (1) 轻氢分子的核是质子(自旋$\frac{1}{2}$)，所以两个核的总体波函数是交换反对称的. 因为两核的旋转本征态是球谐函数 Y_{lm}，所以当 l 为奇数时函数反对称而 l 为偶数时函数对称. 而两核的总自旋态当 $S=1$ 时(ortho 分子)是对称的，而当 $S=0$ 时(para 分子)是反对称的. 由于两核的总波函数须反对称，所以 para 分子的转动态 l 为偶数，而 ortho 分子 l 为奇数.

在热平衡态中，每一种态的分子数目正比于 Boltzmann 因子 e^{-E_l/k_BT}，这里转动态的能量是

$$E_l=\frac{\hbar^2}{2I}l(l+1)$$

因为转动态函数是球谐函数，每个转动能级有 $(2l+1)$ 重空间简并度加上自旋态简并度($S=1$ 时 3 度简并，$S=0$ 时一重简并). 从这些考虑我们可以得到在热平衡时，para 分子数与 ortho 分子数的比例为

$$\frac{n_p}{n_o}=\frac{1}{3}\cdot\frac{\sum\limits_{l=偶}(2l+1)e^{-l(l+1)x}}{\sum\limits_{l=奇}(2l+1)e^{-l(l+1)x}} \tag{1}$$

这里

$$x=\frac{\hbar^2}{2I}\cdot\frac{1}{k_BT} \tag{2}$$

(2) 如果 R_0 是核间距离，m_p 是质子质量，那么分子转动惯量 I 为

$$I=2m_p\left(\frac{R_0}{2}\right)^2=\frac{1}{2}m_pR_0^2 \tag{3}$$

因为 Boltzmann 因子使得式(1)中的求和的各项的大小随着 l 的增大而迅速减小，而且对 R_0 的粗略估计也显示了在 $T=20K$ 时，$l>1$ 的项都可以略去不计. 这一点容易理解，因为我们可以想像 R_0 应当介于 $a_0=53pm$ (a_0 为 Bohr 半径)与 $2a_0$ 之间. 令 $R_0=100pm$，$T=20K$，代入式(2)可得 $x=2.41$，所以对于 $l=2$ 有

$$(2l+1)e^{-l(l+1)x}=5e^{-6x}=2.6\times10^{-6}$$

由于数值很小显然可以略去.

仅仅保留 $l=0,1$ 的项，由式(1)可得

$$\frac{n_p}{n_o}=\frac{1}{9e^{-2x}}=\frac{99.83}{0.17}$$

由上式可求出 $x=4.286$，再由式(2)和式(3)两式可求出

$$R_0=75pm$$

(3) 重氢核是氘核，自旋为 1. 所以对称自旋态(ortho)数与反对称自旋态(para)数比例为 2:1(题 9.27). 氘核是 Bose 子，所以两核的总体波函数是对称的，所以 ortho 态的 l 为偶数，para 态的 l 为奇数. ortho 分子与 para 分子数的比例为

$$\frac{n_o}{n_p}=\frac{2\sum\limits_{l=偶}(2l+1)\mathrm{e}^{-l(l+1)x_d}}{\sum\limits_{l=奇}(2l+1)\mathrm{e}^{-l(l+1)x_d}}$$

这里

$$x_d=\frac{\hbar^2}{m_d R_0^2 k_B T}=\frac{1}{2}x$$

(m_d 是氘核的质量近似等于 zm_p). 类似上面所述将 $l>1$ 的项略去. 所以有

$$\frac{n_o}{n_p}=\frac{2}{3\mathrm{e}^{-x}}=\frac{2}{3}\mathrm{e}^{4.286}=48.5$$

这相当于热平衡时 98.0%的是 ortho 分子.

讨论 除了氢分子的旋转运动，还有两个氢原子之间的距离能够变动导致振动态. 但是这些振动态的能级之间的距离远大于旋转态，在温度为 20K 时，所有的分子都处于最低的振动态. 电子激发的能级也比较高. 对于两核的交换振动基态和电子基态都是对称的，所以在本问题中只考虑核的转动态和自旋态是正确的.

9.34 氢-氘分子两个最低的转动能级的简并度

题 9.34 HD(氢-氘分子)的两个最低的转动能级的简并度是多少?

解 HD 的两个最低转动态 l 值分别为 0 和 1，简并度为 1 和 3(如同上题一样)，两个核的自旋分别是

$$S_1=\frac{1}{2} \quad 和 \quad S_2=1$$

这样共有 $2\times 3=6$ 个自旋态. 因为两个粒子是不全同粒子，态函数无需对称化. 任何自旋态可以和任何空间态相结合，构成总的波函数. 所以 $l=0$ 和 $l=1$ 的能量值的简并度分别是 6 和 18.

9.35 三重电离的镨离子

题 9.35 三重电离的镨离子在 4f 壳层有两个电子. (1) 用 Hund 定则计算离子基态的 L, S, J 值，并找出 Lande g 因子值. (2) 证明当磁感应强度为 $B=1\mathrm{T}$ 的磁场加在镨盐上，在温度 $T=300\mathrm{K}$ 时，镨离子沿磁场方向的磁矩分量的热平均值近似为

$$\bar{\mu}=\frac{1}{3}g^2\mu_B^2\frac{J(J+1)B}{k_B T}$$

这里 μ_B 为 Bohr 磁子. (3) 估算在上述 B 与 T 值下，一克分子镨盐的磁化率(提示：利用离子具有 M_J 的概率正比于 Boltzmann 因子 $\mathrm{e}^{-E/(k_B T)}$，这里 E 是处于 M_J 值时的磁能. 假定本题的

温度下 K_BT 比 LS 能级系列的间隔小的多).

解 (1) 镨离子基态的 L、S、J 值可由 Hund 定则给出. 对于在 4f 壳上两个电子，定则给出

$$S=1,\quad L=5,\quad J=4$$

离子 g 因子为

$$g=1+\frac{J(J+1)+S(S+1)-L(L+1)}{2J(J+1)}=\frac{4}{5}$$

(2) 在磁场 $\boldsymbol{B}$ 存在时，离子沿 $\boldsymbol{B}$ 方向的磁偶极子分量为

$$\mu=gM_J\mu_B \tag{1}$$

它的磁能是

$$E=-gM_J\mu_B B \tag{2}$$

这里 M_J 可取 $-J$，$-J+1\cdots J$.

因为离子具有 M_J 值的概率 P 正比于 $e^{-E/(k_BT)}$，所以有

$$P=\frac{1}{Z}\exp\left(\frac{M_J g\mu_B B}{k_BT}\right) \tag{3}$$

式中

$$Z=\sum_{M_J=-J}^{M_J=J}\exp\left(\frac{M_J g\mu_B B}{k_BT}\right) \tag{4}$$

注意如果保持 J 为常数，则所有 M_J 的概率之和为 1. 这是基于这样的假定，在本题的温度下，离子处于由相同的 L、S 导致的较大的 J 值的态的概率可以忽略，因为那些态的能量太高了，而 k_BT 比起它们之间的能级差太小了.

从式(1)~式(4)，可以得出 μ 的热平均值为

$$\bar{\mu}=\frac{1}{Z}\sum_{M_J=-J}^{J}M_J g\mu_B\exp\left(\frac{M_J g\mu_B B}{k_BT}\right)$$

$$=\frac{g\mu_B\sum\limits_{M_J=-J}^{J}M_J\exp(M_Jx)}{\sum\limits_{M_J=-J}^{J}\exp(M_Jx)}$$

式中，$x=\frac{g\mu_B B}{k_BT}$.

在本题条件下有

$$\frac{\mu_B B}{k_BT}=0.0022$$

所以，在 g 和 M_J 的数量级为 1 的情况下有 $M_Jx\ll 1$，这导致

$$e^{M_Jx}\approx 1+M_Jx$$

因而有

$$\bar{\mu}=g\mu_B\frac{\sum(M_J+xM_J^2)}{\sum(1+xM_J)}$$

求和是对所有的 M_J 值(从 $-J$ 到 J)，所以 M_J 的奇数幂的和为零，上式变为

$$\bar{\mu} = g\mu_B \frac{\sum M_J^2 x}{\sum 1} = \frac{1}{3} g^2 \mu_B^2 \frac{J(J+1)B}{k_B T} \tag{5}$$

上面用到

$$\sum M_J^2 = \frac{1}{3} J(J+1)(2J+1)$$

$$\sum 1 = 2J+1$$

(3) 克分子磁化率由下式定义

$$x_{mol} = \frac{\mu_0 N_A \bar{\mu}}{B}$$

这里 N_A 是 Avogadro 常数，由式(5)可得

$$x_{mol} = \frac{1}{3} \mu_0 N_A g^2 \mu_B^2 \frac{J(J+1)}{k_B T} \tag{6}$$

将 g、J、T 和原子常数代入式(6)可得

$$x_{mol} = 6.7 \times 10^{-8} \mathrm{m}^3 \cdot \mathrm{mol}^{-1}$$

讨论 (1) 由式(6)可见，倘若 $\mu_B B \ll k_B T$，则磁化率独立于 B 而反比于温度 T. 后者变化正如 Curie 定律. 因为 $\mu_B B \ll k_B T$ 在很大的实验条件下被满足，所以此定律有广泛的适用性.

(2) 如果不同的 J 值态的能量间隔比 $k_B T$ 大，这里 T 为室温，则我们说 LS 系列远离，这正是像镨这样的稀土元素的情况. 如果 Curie 定律的条件满足，稀土元素磁化率的实验值与式(6)的理论值符合的很好.

当离子群具有狭义的 SL 系列，即不同 J 值态的能级间隔小于室温下的 $k_B T$ 值. 一个狭的 SL 系列意味着原子中自旋-轨道作用力相对较弱，我们可以忽略自旋角动量与轨道角动量的耦合而认为原子有独立的自旋磁矩与轨道磁矩，它们各自对磁化率有所贡献，而 g 因子值分别为 2 和 1. 这样对于一个狭的 SL 系列，式(6)变成

$$x_{mol} = \frac{1}{3} \mu_0 N_A \mu_B^2 \frac{L(L+1) + 4S(S+1)}{k_B T} \tag{7}$$

然而，式(7)的计算值与实验并不符合. 原因是离子族盐晶体中原子之间的静电力使 L 等效为零，这一现象被称为淬灭. 将 $L=0$ 代入式(7)后所得的值与实验相符很好.

9.36 He 离子和 He 原子的电子波函数

题 9.36 (1) 假定你已经解出了一次电离的 He 原子的 Schrödinger 方程，得到一组本征函数 $\phi_N(\boldsymbol{r})$. (i) ϕ_N 和氢原子波函数相比，有何不同? (ii) 如果加上自旋部分，σ^+ (或 σ^-) 表示自旋向上(或向下)，怎样将 ϕ 和 σ 结合起来，得到具有确定自旋的本征函数? (2) 现在考虑到 He 原子有两个电子，但忽略它们之间的电磁相互作用. (i) 用 ϕ 和 σ 写出一个具有确定自旋的典型的两电子波函数(不要选择基态). (ii) 在你的例子中，总自旋是多少? (iii) 说明你的例子不违反 Pauli 不相容原理. (iv) 说明你的例子对于交换电子反对称.

解 (1) (i)出现在类氢离子波函数中的唯一的表征位势强度的量是 Bohr 半径

$$r_0=\frac{\hbar^2}{\mu Ze^2}$$

μ 是系统的折合质量，Z 是原子核核电荷数. 因此 ϕ_N 与氢原子波函数相比，只是 Bohr 半径不同，$a_{0(\text{He})}=\frac{1}{2}a_{0(\text{H})}$.

(ii) ϕ_N 同 $\sigma^{\pm}$ 属于不同的空间，为得到具有确定自旋值的本征函数，只要将 ϕ_N 同 $\sigma^{\pm}$ 直乘即可.

(2) (i)、(ii)例如

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\phi_N(1)\phi_N(2)\left[\sigma^+(1)\sigma^-(2)-\sigma^-(1)\sigma^+(2)\right]$$

总自旋为 0

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\phi_{N1}(1)\phi_{N2}(2)-\phi_{N2}(1)\phi_{N1}(2)\right]\sigma^+(1)\sigma^+(2)$$

总自旋为 1.

(iii)、(iv)是很显然的.

9.37 求氦原子中二个电子分别处于基态与第一激发态时，存在的 8 个轨道波函数的性质

题 9.37 忽略电子自旋，将氦原子中两个电子相对于核的位置记为 $\boldsymbol{r}_i\ (i=1,\ 2)$，它们的 Hamilton 量可以写成

$$H=\sum_{i=1}^{2}\left(\frac{p_i^2}{2m}-\frac{2e^2}{|\boldsymbol{r}_i|}\right)+V,\qquad V=\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}$$

(1) 证明一个电子在类氢原子基态，另一个在第一激发态时，存在 8 个是 $H_0\equiv H-V$ 的本征函数的轨道波函数. (2) 用对称性的考虑，证明 V 在这 8 个态中的所有矩阵元可以用它们中的四个来表示. (**提示** 用正比于 $\frac{x}{|\boldsymbol{r}|}$，$\frac{y}{|\boldsymbol{r}|}$，$\frac{z}{|\boldsymbol{r}|}$ 的 $l=1$ 球谐函数的线性组合也许是有帮助的). (3) 证明如果用 H_0 的 8 个本征函数的线性组合作为试探函数，变分原理会给出决定 8 个激发态能级的行列式方程. 用 V 的四个独立的矩阵元表示出能级分裂. (4) 讨论由于 Pauli 不相容原理，能级的简并情况.

解 类氢原子的本征函数记为

$$|n,l,m\rangle$$

则 8 个 H_0 的本征函数可选为 $(l=0,\ 1,\ m=-l,\ \cdots,\ l)$

$$|lm\pm\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[|(100)_1(2lm)_2\rangle\pm|(2lm)_1(100)_2\rangle\right]$$

其中，下标 1，2 分别标记两个电子. 这态相应的能量为

$$E_{\text{B}}=E_1+E_2=-\frac{\mu(2e^2)^2}{2\hbar^2}\left(1+\frac{1}{4}\right)=-\frac{5\mu e^4}{2\hbar^2}$$

是核电荷为 2 的类氢原子基态和第一激发态的能量之和.

现把电子间的相互作用

$$V_{12} = \frac{e^2}{|r_1 - r_2|}$$

当作微扰项. 则需要计算的矩阵元为

$$\langle l'm' \pm | V_{12} | lm \pm \rangle$$

考虑到 V_{12} 具有转动不变性并且对两个电子是对称的，而 $|lm\pm\rangle$ 又是空间转动的本征态，于是有下列矩阵元

$$\langle (100)_1(2l'm')_2 | V_{12} | (100)_1(2lm)_2 \rangle = \langle (2l'm')_1(100)_2 | V_{12} | (2lm)_1(100)_2 \rangle = \delta_{ll'}\delta_{mm'}A_l$$

$$\langle (100)_1(2l'm')_2 | V_{12} | (2lm)_1(100)_2 \rangle = \langle (2l'm')_1(100)_2 | V_{12} | (100)_1(2lm)_2 \rangle = \delta_{ll'}\delta_{mm'}B_l$$

这样可以算出

$$\langle l'm' + | V_{12} | lm + \rangle = \delta_{ll'}\delta_{mm'}(A_l + B_l)$$

$$\langle l'm' + | V_{12} | lm - \rangle = 0$$

$$\langle l'm' - | V_{12} | lm + \rangle = 0$$

$$\langle l'm' - | V_{12} | lm - \rangle = \delta_{ll'}\delta_{mm'}(A_l - B_l)$$

由于我们一开始是按关于电子的交换对称性组合波函数的，所以，我们看到微扰矩阵是对角的. 于是，我们得到四条分裂的能级. 第一条能级的能量是 $E_B + A_1 + B_1$；该能级对应的态是 $|1m+\rangle$.

第二条能级的能量是 $A_1 - B_1 + E_B$；该能级对应的态是 $|1m-\rangle$.

第三条能级的能量是 $E_B + A_0 + B_0$；该能级对应的态是 $|00+\rangle$.

第四条能级的能量是 $E_B + A_0 - B_0$；该能级对应的态是 $|00-\rangle$.

其中，$|1m+\rangle$ 和 $|1m-\rangle$ $(m = \pm 1,\ 0)$ 各是三重简并的.

考虑到 Pauli 原理，则要加上自旋波函数. 不管轨道-自旋耦合，则总自旋波函数为

χ_{00}　　反对称，单态.

χ_{1s_z}　　对称，三重态.

由于电子总的波函数必须是对电子的交换是反对称的，我们必须作如下组合

$$|lm+\rangle \chi_{00}$$

$$|lm-\rangle \chi_{1s_z}$$

于是得各能级的简并度如下

$E_B + A_0 - B_0$	3
$E_B + A_0 + B_0$	1
$E_B + A_1 - B_1$	9
$E_B + A_1 + B_1$	3

9.38 由氦原子的最低 p 态的近似波函数组成 12 个反对称态，并研究其性质

题 9.38 从下列已知的核电荷为 Z 的类氢波函数出发，描述中性氦原子的最低 p 态 ($L=1$)的近似波函数和能级

$$\psi_{1s}=\pi^{-1/2}a^{-3/2}e^{-r/a},\qquad a=\frac{a_0}{Z}$$

$$\psi_{2p,m_l=0}=(32\pi)^{-1/2}a^{-5/2}re^{-r/2a}\cos\theta$$

等. (1) 你应该按 Russell-Saunders 耦合图像将这总共 12 个态(2 自旋分量×2 自旋分量×3 轨道分量)分类，注意各个态应该是反对称的. (2) 对这两个轨道波函数各给出一个"Z"的估计(最相近的整数)，这导致比基态高多少的能量？可以用什么数学过程去计算最佳 Z 值？(3) 写出一个积分，它给出由于电子间的排斥作用而引起的这 12 个态中两个子集的分裂. 哪些态的能量较低？(4) 其中的哪些 p 态能通过单光子发射衰变到原子的基态(电偶极跃迁)？(5) 通过电偶极作用，存在其他 $L=1$ 的激发态能辐射一个光子而衰变为上面所讨论的某个 P 态吗？如果有，则用通常的光谱符号给出一个例子.

解 (1) 为方便起见，用 Dirac 符号表示态. 下面先将空间波函数对称化、反对称化

$$|\psi_1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\big(|1s\rangle|2p,m_l=1\rangle+|2p,m_l=1\rangle|1s\rangle\big)$$

$$|\psi_2\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\big(|1s\rangle|2p,m_l=1\rangle-|2p,m_l=1\rangle|1s\rangle\big)$$

$$|\psi_3\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\big(|1s\rangle|2p,m_l=0\rangle+|2p,m_l=0\rangle|1s\rangle\big)$$

$$|\psi_4\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\big(|1s\rangle|2p,m_l=0\rangle-|2p,m_l=0\rangle|1s\rangle\big)$$

$$|\psi_5\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\big(|1s\rangle|2p,m_l=-1\rangle+|2p,m_l=-1\rangle|1s\rangle\big)$$

$$|\psi_6\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\big(|1s\rangle|2p,m_l=-1\rangle-|2p,m_l=-1\rangle|1s\rangle\big)$$

式中，对称的空间波函数$|\psi_1\rangle$，$|\psi_3\rangle$，$|\psi_5\rangle$与自旋单态的乘积$|\psi_i\rangle\chi_{00}$，($i=1, 3, 5.$)构成 3 个单态，而反对称的空间波函数$|\psi_2\rangle$，$|\psi_4\rangle$，$|\psi_6\rangle$与自旋三重态的乘积$|\psi_i\rangle\chi_{1m}$($i=2, 4, 6.$ $m=0, \pm1$)构成 9 个三重态. 如果要在耦合表象中表示出这 12 个态，还必须对上述已经反对称化的波函数进行组合.

3 个单态的波函数为

$$^1\mathrm{P}_1,\ |m_J=1\rangle=|\psi_1\rangle\chi_{00}$$

$$|m_J=0\rangle=|\psi_3\rangle\chi_{00}$$

$$|m_J=-1\rangle=|\psi_5\rangle\chi_{00}$$

9 个三态的波函数为

$$^3\mathrm{p}_2,\ |m_J=2\rangle=|\psi_2\rangle\chi_{11}$$

$$|m_J=1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_2\rangle\chi_{10}+|\psi_4\rangle\chi_{11}\right)$$

$$|m_J=0\rangle=\sqrt{\frac{1}{6}}|\psi_2\rangle\chi_{1-1}+\sqrt{\frac{2}{3}}|\psi_4\rangle\chi_{10}+\sqrt{\frac{1}{6}}|\psi_6\rangle\chi_{11}$$

$$|m_J=-1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_4\rangle\chi_{1-1}+|\psi_6\rangle\chi_{10}\right)$$

$$|m_J=-2\rangle=|\psi_6\rangle\chi_{1-1}$$

$$^3\mathrm{p}_1,\ |m_J=1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_2\rangle\chi_{10}-|\psi_4\rangle\chi_{11}\right)$$

$$|m_J=0\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_2\rangle\chi_{1-1}-|\psi_4\rangle\chi_{11}\right)$$

$$|m_J=-1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_4\rangle\chi_{1-1}-|\psi_6\rangle\chi_{10}\right)$$

$$^3\mathrm{p}_0,\ |m_J=0\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}\left(|\psi_2\rangle\chi_{1-1}-|\psi_4\rangle\chi_{10}+|\psi_6\rangle\chi_{11}\right)$$

(2) 由于2p轨道上的电子云主要在1s轨道上的电子云的外部，所以$|1\mathrm{s}\rangle$波函数的$Z=2$，而$|2\mathrm{p}\rangle$波函数的$Z=1$. 这种理解导致出能量高于基态

$$\Delta E=E_1-E_0=\left(2^2\times E+\frac{1}{4}E\right)-(2\times2^2\times E)$$

$$=-\frac{15}{4}E=-\frac{15}{4}\times(-13.6)\mathrm{eV}=51\mathrm{eV}$$

为了计算最佳的Z值，可以用给出的波函数去计算屏蔽效应，从而拟合出Z值.

(3) 所需求的积分是来自对称波函数与反对称波函数. 我们可以将这两种波函数表示成一个带参量的函数

$$|\psi_\varepsilon\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1\mathrm{s}\rangle|2\mathrm{p}\rangle+\varepsilon|2\mathrm{p}\rangle|1\mathrm{s}\rangle\right),\qquad \varepsilon=\pm1$$

电子间的排斥作用为

$$H'=\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}$$

它引起两套波函数的能级分裂

$$\langle\psi_\varepsilon|H'|\psi_\varepsilon\rangle=\frac{1}{2}\left(\left(\langle1\mathrm{s}|\langle2\mathrm{p}|+\varepsilon\langle2\mathrm{p}|\langle1\mathrm{s}|\right)H'\left(|1\mathrm{s}\rangle|2\mathrm{p}\rangle+\varepsilon|2\mathrm{p}\rangle|1\mathrm{s}\rangle\right)\right)$$

$$=\langle1\mathrm{s}2\mathrm{p}|H'|1\mathrm{s}2\mathrm{p}\rangle+\varepsilon\langle1\mathrm{s}2\mathrm{p}|H'|2\mathrm{p}1\mathrm{s}\rangle$$

第二项“交换积分”对能级分裂有贡献. 它用积分表示为

$$J=\int\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2\psi_{1\mathrm{s}}^*(\boldsymbol{r}_1)\psi_{1\mathrm{s}}(\boldsymbol{r}_2)\psi_{2\mathrm{p}}^*(\boldsymbol{r}_2)\psi_{2\mathrm{p}}(\boldsymbol{r}_1)\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}$$

并且容易看出 $k>0$，所以三重态 ($\varepsilon=-1$) 的能量较低(因为空间波函数反称，两电子相互"回避")．

(4) 电偶极辐射的跃迁选择法则

$\Delta L=0,\ \pm1,\ \Delta S=0,\ \Delta J=0,\ \pm1\ (0\leftrightarrow0)$ 宇称改变．给出能跃迁到基态 $^1\mathrm{s}_0$ 的态为 $^1\mathrm{p}_1$ 态．

(5) 存在所要求的激发态，如 2p3p 电子组态中的 $^3\mathrm{p}_1$ 态就可以电偶极跃迁至上述的 $^3\mathrm{p}_{2,1,0}$ 态中任意一个．

9.39 在两个基态氢原子系统中，有三个排斥态与一个吸引态

题 9.39 尽可能好地证明下列陈述是有道理的："在两个基态氢原子系统中，有三个排斥态和一个吸引态(束缚态)"．

证明 根据绝热近似，在讨论两电子的运动时，核之间距离看成是不变的．考虑两电子运动的波函数。当总自旋 $S_t=1$ 时，自旋部分波函数对两个电子交换是对称的，故空间部分波函数对两个电子交换是反对称的，即两电子在空间靠近的概率较小，故是排斥态，而这样的态有三个．当 $S_t=0$ 时，空间部分波函数对两电子交换是对称的，即两电子在空间靠近的概率较大，故是吸引态，这样的态有一个．

9.40 氘核的简化模型：$V=V_a(r)+V_b(r)\boldsymbol{S}_\mathrm{n}\cdot\boldsymbol{S}_\mathrm{p}$

题 9.40 在氘核的简化模型中，势能形式为

$$V=V_a(r)+V_b(r)\boldsymbol{S}_\mathrm{n}\cdot\boldsymbol{S}_\mathrm{p}$$

其中 $\boldsymbol{S}_\mathrm{n}$ 和 $\boldsymbol{S}_\mathrm{p}$ 为两个自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子的自旋算子，V_a 和 V_b 是粒子间距 r 的函数．将两粒子的质量记为 m_n 和 m_p．(1) 能量本征值问题可化为以 r 为变量的一维问题，写出此一维方程．(2) 若 V_a 和 V_b 都不大于 0，说明基态是单态还是三态．

解 (1) 取单位使 $\hbar=1$，对于单态

$$\boldsymbol{S}_\mathrm{n}\cdot\boldsymbol{S}_\mathrm{p}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{S}_\mathrm{n}+\boldsymbol{S}_\mathrm{p})^2-\frac{1}{2}\boldsymbol{S}_\mathrm{n}^2-\frac{1}{2}\boldsymbol{S}_\mathrm{p}^2=-\frac{3}{4}$$

势能可以写成

$$V_{单}=V_a(r)-\frac{3}{4}V_b(r)$$

$$H=-\frac{1}{2m_\mathrm{n}}\nabla_n^2-\frac{1}{2m_\mathrm{p}}\nabla_p^2+V_a(r)-\frac{3}{4}V_b(r)$$

相对运动的 Hamilton 量为

$$H_r=-\frac{1}{2m}\nabla_r^2+V_a(r)-\frac{3}{4}V_b(r)$$

∇_r^2 为相对位置坐标所对应的 Laplace 算子，$m=\dfrac{m_\mathrm{n}m_\mathrm{p}}{m_\mathrm{n}+m_\mathrm{p}}$ 为两粒子的折合质量．

将角变量θ、φ从Schrödinger方程中分离出去后，能量本征值可从径向波函数$R(r)$满足的一维方程

$$-\frac{1}{2mr}\cdot\frac{d^2}{dr^2}(rR)+\left[\frac{l(l+1)}{2mr^2}+V_a(r)-\frac{3}{4}V_b(r)\right](rR)=E(rR)$$

中得到. 仿此，对于三重态

$$V_{三}=V_a(r)+\frac{1}{4}V_b(r)$$

相应的一维方程为

$$-\frac{1}{2mr}\cdot\frac{d^2}{dr^2}(rR)+\left[\frac{l(l+1)}{2mr^2}+V_a(r)+\frac{1}{4}V_b(r)\right](rR)=E(Rr)$$

(2) 我们先引入一条引理，在一维能量本征值问题中，在其他条件相同的情况下，两个不同的势能之间，若

$$V'(x)\geqslant V(x)\,,\qquad -\infty<x<\infty$$

则相应能级$E_n'>E_n$.

显然在本题中对于基态有$l=0$，由于$V_b\leqslant 0$，$V_{单}>V_{三}$. 所以基态为三重态.

9.41 比较氢原子单态，三重态能量高低，及氢分子核自旋态单态与三重态能量高低

题 9.41 (1) 由于超精细作用氢原子的基态发生劈裂标出它的能级图，并从基本原理出发指出哪一个态能量较高. (2) 氢分子的基态劈裂成核自旋单态和核自旋三重态，从基本原理出发指出哪一个态的能量较高.

解 (1) $H_{hf}=-\boldsymbol{\mu}_p\cdot\boldsymbol{B}_e$，其中$\boldsymbol{\mu}_p$为质子内禀磁矩，$\boldsymbol{B}_e$是电子内禀磁矩所产生的磁场. 在基态情况下，电子的概率密度是球对称的，由对称性考虑$\boldsymbol{B}_e$应与$\boldsymbol{\mu}_e$同方向，$\boldsymbol{\mu}_e$为电子内禀磁矩，又

$$\boldsymbol{\mu}_e=-\frac{e}{m_ec}\boldsymbol{S}_e,\qquad \boldsymbol{\mu}_p=-\frac{eg_p}{2m_pc}\boldsymbol{S}_p,\qquad g_p>0$$

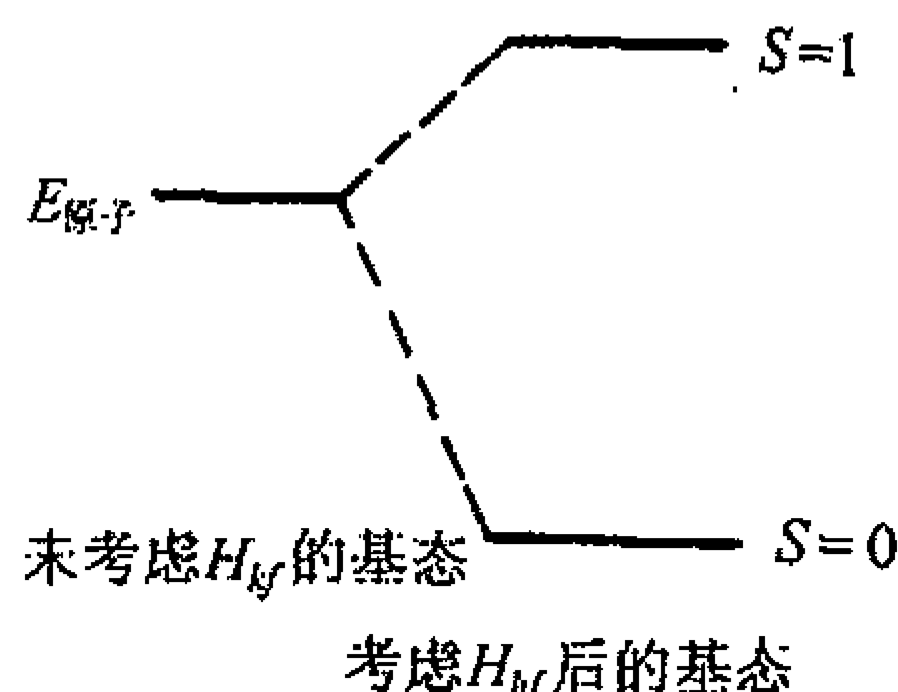
所以$\boldsymbol{B}_e$与$\boldsymbol{S}_e$反向，$-\langle\boldsymbol{\mu}_p\cdot\boldsymbol{B}_e\rangle$与$\langle\boldsymbol{S}_e\cdot\boldsymbol{S}_p\rangle$同号. 此时劈裂成的两个态是$(\boldsymbol{S}_e+\boldsymbol{S}_p)^2$和$(\boldsymbol{S}_e+\boldsymbol{S}_p)_z$的本征态，它们是总自旋单态和总自旋三重态.

$$\begin{aligned}\langle\boldsymbol{S}_e\cdot\boldsymbol{S}_p\rangle&=\frac{1}{2}\langle(\boldsymbol{S}_e+\boldsymbol{S}_p)^2-\boldsymbol{S}_e^2-\boldsymbol{S}_p^2\rangle\\&=\frac{1}{2}\left[S(S+1)\hbar^2-\frac{3}{4}\hbar^2-\frac{3}{4}\hbar^2\right]\\&=\frac{1}{4}[2S(S+1)-3]\hbar^2\end{aligned}$$

由电子，质子，自旋皆为$\hbar/2$，可知 $S=\begin{cases}0, & 单态\\ 1, & 三重态\end{cases}$

$$\langle S_e \cdot S_p \rangle = \begin{cases} \dfrac{3}{4}\hbar^2 < 0, & S=0 \ \text{单态} \\ \dfrac{1}{4}\hbar^2 > 0, & S=1 \ \text{三重态} \end{cases}$$

所以由于超精细作用引起的劈裂造成氢原子的基态分成$S=0$与$S=1$(即总自旋单态与三重态)，其中三重态的能量较高. 能级图如题图 9.41 所示.



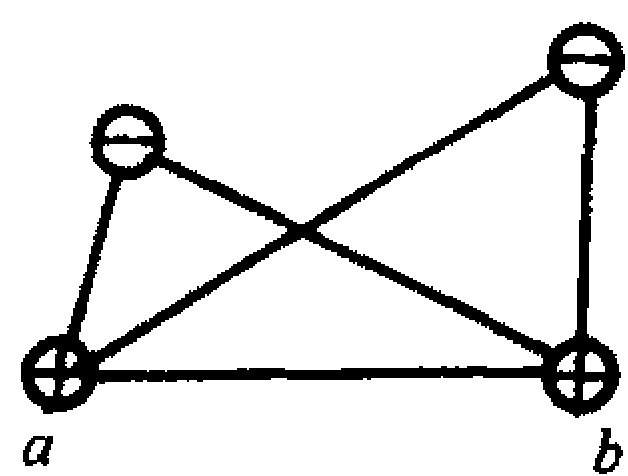
题图 9.41

从物理上考虑由于氢原子基态的超精细劈裂是由质子与电子内禀磁矩相互作用造成的，对于电子，它的内禀磁矩与其自旋反向，对于质子，它的内禀磁矩与其自旋同向. 对于自旋三态，电子与质子自旋同向，它们的内禀磁矩反向. 对于自旋单态，电子与质子自旋反向. 它们的内禀磁旋同向，在空间波函数相同情况下，前者之间 Coulomb 能大于后者之间 Coulomb 能. 故三重态能量较高.

(2) 对于 H_2 分子，由于质子是 Fermi 子，总波函数必须对两质子交换反称，故对于核自旋单态，核的转动量子数 L 可为$0,2,\cdots$其中以$L=0$能量最低，对于核自旋三重态，转动量子数可以是$L=1,3,5,\cdots$其中以 $L=1$ 能量最低，又由于L不同引起的能量差大于由核自旋不同引起的能量差，所以$L=1$(核自旋$S=1$)态的能量高于$L=0$(核自旋$S=0$)态. 所以氢分子的基态劈裂中，核自旋三重态能量较高.

由于$L=1$态与0态的空间波函数分别是反对称与对称的，后者的质子与质子接近机会大于前者，其 Coulomb 能也较前者为高. (在主量子数n相同时). 但由于转动能级中$L=0$与$L=1$的能量差比 Coulomb 能差大，故氢原子基态劈裂中，核自旋三态能量较高.

9.42 两氢原子系统的波函数和势能曲线



题图 9.42(a)

题 9.42 用氢原子波函数可近似描述两氢原子系统的波函数. (1) 分别给出单态和三态最低态的完全波函数，画出波函数沿两原子连线上的题图 9.42(a). (2) 在上述两种情况下，作出两氢原子系统的势能曲线(势能与两原子核之间距离的曲线，忽略系统的旋转). 解释曲线形状的物理原因和两曲线不同之处的原因.

解 $H=H_{核}+H_{电}$. 总波函数为$\psi=\psi_{核}\phi$

$$\psi_{核}=\begin{cases} R_\nu(r)Y_{IM}(\theta,\varphi)\chi_0, & I=\text{偶，仲氢} \\ R_\nu(r)Y_{IM}(\theta,\varphi)\chi_1, & I=\text{奇，正氢} \end{cases}$$

ϕ为氢原子电子波函数，ν代表振动，I代表转动.

(1) 设类氢原子空间基态波函数为

$$\varphi(r)=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{\lambda}{a}\right)^{3/2}\mathrm{e}^{-\lambda r/a}$$

$\lambda=1$时，$\varphi(r)$为氢原子基态波函数.

则氢分子的最低电子单态波函数为

$$\phi_{单} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\varphi(r_{a1})\varphi(r_{b2}) + \varphi(r_{a2})\varphi(r_{b1})\right]\chi_{0电子}$$

最低三态波函数为

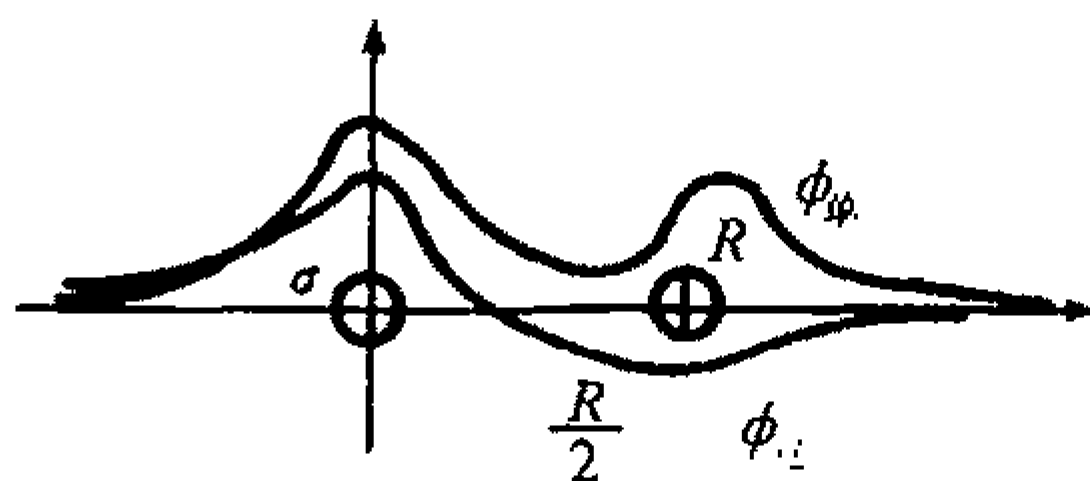
$$\phi_{三} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\varphi(r_{a1})\varphi(r_{b2}) - \varphi(r_{a2})\varphi(r_{b1})\right]\chi_{1电子}$$

取 ab 连线为 x 轴，a 选为原点，则空间部分

$$\phi_{单} = b\left(e^{-kx_1}e^{-k|R-x_2|} + e^{-kx_2}e^{-k|R-x_1|}\right)$$

$$\phi_{三} = b\left(e^{-kx_1}e^{-k|R-x_2|} - e^{-kx_2}e^{-k|R-x_1|}\right)$$

固定其中的一个变量(如 x_2)画图(否则要作曲面图)，结果如题图 9.42(b)所示. 从图中可以看出，若一个电子靠近一原子核，则另一电子在另外一原子核附近出现的概率大.

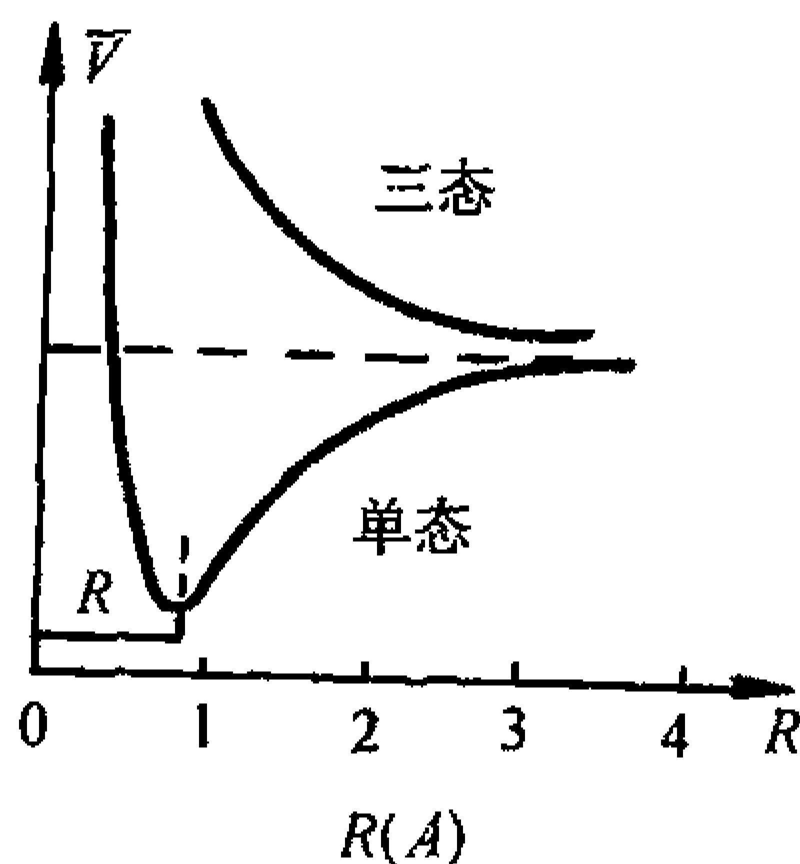


题图 9.42(b)

(2) 忽略核子的振动与转动能量，则氢分子势能由电子波函数和 R 确定

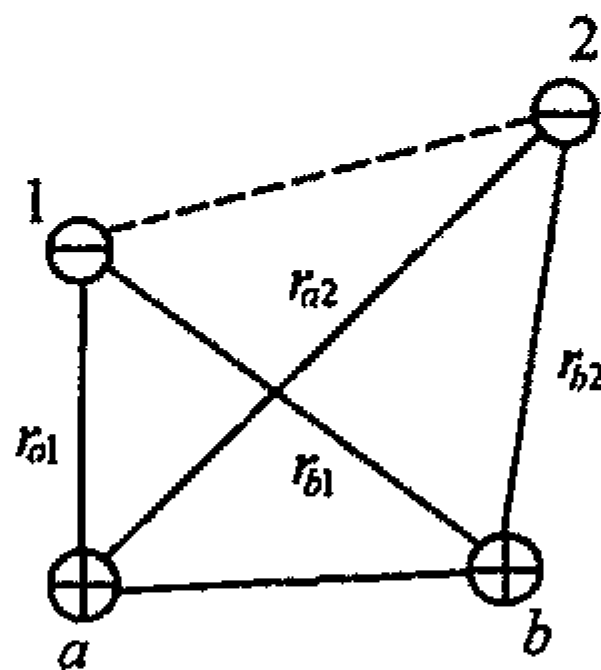
$$V = -\left(\frac{1}{r_{a1}} + \frac{1}{r_{a2}} + \frac{1}{r_{b1}} + \frac{1}{r_{b2}}\right)e^2 + \frac{e^2}{r_{12}} + \frac{e^2}{R} + V_0$$

有效势为 $\overline{V} = \langle\phi|V|\phi\rangle$，势能曲线如题图 9.42(c)所示，以中性原子相隔无穷远时的势能为零. 因此，$R \to \infty$ 时，$\overline{V} \to 0$. 当 $R \to 0$ 时，两氢核之间的势能变成无穷大. 而电子与核之间的势类似 He 原子中电子势，是有限的. 因此 $R \to 0$，$\overline{V} \to +\infty$. R 从很大往小变时，核之间排斥势增大，然而核与电子之间的引力势也增大，两者相互竞争. 对单态而言，两电子在两核之间概率较大，这样，因为两电子对两核的吸引，使得势出现一个极小值；而三态，两电子在两核之间概率较小，从而核与电子引力势(<0)减小不多，核之间排斥势(>0)占主要地位，从而 $\overline{V} > 0$，没有极小值出现.



题图 9.42(c)

9.43 氢分子的波函数



题图 9.43

题 9.43 (1) 利用氢原子基态波函数(包括电子自旋)写出满足 Pauli 不相容原理的氢分子波函数. 忽略两个电子在同一氢原子核上的项. 用总自旋对波函数分类. (2) 假设 Hamilton 量中的势能项来自 Coulomb 力, 定性讨论(1)中态的能量 (i) 分子中原子核之间间距处于正常距离; (ii) 原子核间距非常大时. (3) "交换力"的含意是什么?

解 (1) 如题图 9.43 所示,氢原子基态波函数为$|100\rangle$. 氢分子的单态波函数为

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi(\boldsymbol{r}_{a1})\varphi(\boldsymbol{r}_{b2}) + \varphi(\boldsymbol{r}_{a2})\varphi(\boldsymbol{r}_{b1})]\chi_{00}$$

三态波函数为

$$\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi(\boldsymbol{r}_{a1})\psi(\boldsymbol{r}_{b2}) - \psi(\boldsymbol{r}_{a2})\psi(\boldsymbol{r}_{b1})]\chi_{1M}$$

(2) 两氢原子能量之和是 $-2\times13.6=-27.2\text{eV}$, He 的基态能量是 $-27.2\times\left(2-\frac{5}{16}\right)^2 = -77.5\text{eV}$.

(i) 单态,两电子靠近的概率较大,斥力交换势能增加;但同时两电子在两核附近的概率也较大,吸力交换势能更低. 总的交换作用结果使势能降低. 容易看出,单态能量范围是 $-77.5\text{eV}<E_1<-27.2\text{eV}$;三态正好相反,自旋平行,空间波函数反称,总的交换作用使势能增加,不易形成束缚态, $E_3>-27.2\text{eV}$.

(ii) 核间距$\to\infty$时, H_2变成两个氢原子,所以能量$\to -27.2\text{eV}$.

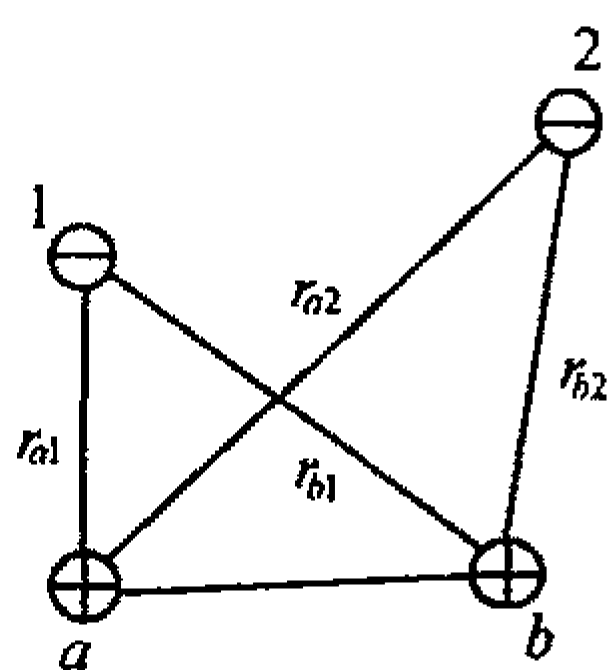
(3) 由于波函数的对称化或反称化所带来的势能平均值的移动

$$\Delta V = \iint \varphi(\boldsymbol{r}_{a1})\varphi(\boldsymbol{r}_{b2})V\varphi(\boldsymbol{r}_{a2})\varphi(\boldsymbol{r}_{b1})\mathrm{d}\tau_1\mathrm{d}\tau_2$$

这就是由所谓"交换力"所造成的.

9.44 氢分子由两最低激发态到基态的跃迁特性

题 9.44 描述氢分子较低的几个能态,给出激发态的粗略能量值. 两最低激发态跃迁到基态,其特性是什么(题图 9.44)?



题图 9.44

解 $\varphi(r)=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{\lambda}{a_0}\right)\mathrm{e}^{-\lambda r/a_0}$, 式中 a_0 为 Bohr 半径, λ 为待定常数. 氢分子基态的电子波函数自旋部分是反称的($S=0$),而空间部分则是对称的. 因此,两个电子在空间中能够彼此靠近,即在两原子核之间的空间区域中"电子云"的密度较大,而在此区域中,两个电子同两个原子核都有较强的吸引力,从而形成束缚态. 波函数为

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\varphi(\boldsymbol{r}_{a1})\varphi(\boldsymbol{r}_{b2}) + \varphi(\boldsymbol{r}_{a2})\varphi(\boldsymbol{r}_{b1})\right]\chi_{00}$$

若电子的自旋平行，则空间部分波函数必反称，两电子彼此靠近概率小，实际情况是，不能形成束缚态.

电子能级、核振动能级、转动能级三者相比，转动能级差最小. 因此，本题只考虑电子处于基态，核之间无振动，仅有转动的情况. 无妨设氢分子无转动时的能量为 0，转动能级为

$$E = \frac{\hbar^2}{2I}J(J+1)$$

J 为核转动轨道角量子数.

J 为偶数时，核空间波函数交换对称，故自旋波函数交换反对称. H_2 中两质子的总自旋为 0，即形成自旋单态(仲氢).

J 为奇数时，核空间波函数交换反对称，核自旋波函数对称，所以 H_2 中两质子的总自旋为 1，即形成自旋三态(正氢).

假设两质子间距为 $2\times 0.53 = 1.06$ Å. 则较低几个激发态的能量为

仲氢：	0(eV)，	0.89(eV)，	2.96(eV)
J ：	0	2	4
正氢：	0.30(eV)，	1.78(eV)，	4.46(eV)
J ：	1	3	5

两原子之间的作用力可认为与核自旋无关，因此在光跃迁过程中，正氢和仲氢之间不能相互转化. 则 Δl 为偶数. 在自然界中正氢与仲氢分子数目之比为 3∶1. 因此，$J=2\to J=0$ 的光谱线比 $J=3\to J=1$ 的光谱线弱.

9.45 一群自旋为 J 的原子

题 9.45 一群自旋为 J 的原子，及密度矩阵为 $\boldsymbol{\rho}$. 如果这些自旋受随机涨落的磁场的影响，那么发现密度矩阵随时间的张弛由下式给出

$$\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{\rho} = \frac{1}{T}\left[J_x\boldsymbol{\rho}J_x + J_y\boldsymbol{\rho}J_y + J_z\boldsymbol{\rho}J_z - J(J+1)\boldsymbol{\rho}\right]$$

证明上述关系式意味着下述式子成立

(1) $\frac{\partial}{\partial t}\langle J_z\rangle = \frac{\partial}{\partial t}\mathrm{Tr}\langle J_z\boldsymbol{\rho}\rangle = -\frac{1}{T}\langle J_z\rangle$.

(2) $\frac{\partial}{\partial t}\langle J_z^2\rangle = \frac{\partial}{\partial t}\mathrm{Tr}\langle J_z^2\boldsymbol{\rho}\rangle = -\frac{3}{T}\langle J_z^2\rangle + \frac{J(J+1)}{T}$.

证明 由定义 $\langle J_z\rangle = \mathrm{Tr}(\boldsymbol{\rho}J_z)$，利用

$$\mathrm{Tr}(ABC) = \mathrm{Tr}(BCA) = \mathrm{Tr}(CAB)$$

可以证明下列各式.

(1) $\frac{\partial}{\partial t}\langle J_z\rangle=\mathrm{Tr}\left(\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{\rho} J_z\right)$

$$=\frac{1}{T}\mathrm{Tr}\left[\boldsymbol{\rho} J_x J_z J_x+\boldsymbol{\rho} J_y J_z J_y+\boldsymbol{\rho} J_z^3-J(J+1)\boldsymbol{\rho} J_z\right]$$

$$=\frac{1}{T}\mathrm{Tr}\left\{\boldsymbol{\rho}\left[(J_x^2+J_y^2+J_z^2)J_z+\mathrm{i}J_xJ_y-\mathrm{i}J_yJ_x-J(J+1)J_z\right]\right\}$$

$$=-\frac{1}{T}\mathrm{Tr}(\boldsymbol{\rho} J_z)=-\frac{1}{T}\langle J_z\rangle$$

(2) $\frac{\partial}{\partial t}\langle J_z^2\rangle=\mathrm{Tr}\left(\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{\rho} J_z^2\right)$

$$=\frac{1}{T}\mathrm{Tr}\left[\boldsymbol{\rho} J_x J_z^2 J_x+\boldsymbol{\rho} J_y J_z^2 J_y+\boldsymbol{\rho} J_z^4-J(J+1)\boldsymbol{\rho} J_z^2\right]$$

$$=\frac{1}{T}\mathrm{Tr}\left[\boldsymbol{\rho}(J_zJ_xJ_xJ_z+J_yJ_zJ_yJ_z+\mathrm{i}J_xJ_zJ_y-\mathrm{i}J_yJ_zJ_x+J_z^4)-J(J+1)\boldsymbol{\rho} J_z^2\right]$$

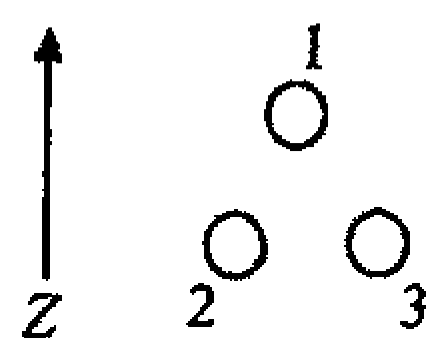
$$=\frac{1}{T}\mathrm{Tr}\left\{\boldsymbol{\rho}\left[J_x^2J_z^2+J_y^2J_z^2+\mathrm{i}J_xJ_yJ_z-\mathrm{i}J_yJ_xJ_z\right.\right.$$

$$\left.\left.+\mathrm{i}J_zJ_xJ_y-\mathrm{i}J_zJ_yJ_x+J_y^2+J_x^2+J_z^4-J(J+1)J_z^2\right]\right\}$$

$$=-\frac{3}{T}\langle J_z^2\rangle+\frac{J(J+1)}{T}$$

9.46 等边三角形的顶点上三个相同原子组成的分子

题 9.46 一个分子由处于等边三角形的顶点的三个相同的原子组成(题图 9.46). 把其离子考虑为在各个顶点上以一定的概率幅加入一个电子,假定电子在两个相邻的顶点间的 Hamilton 量矩阵元为 $\langle i|H|j\rangle=-a\ (i\neq j)$. (1) 计算能级分裂. (2) 假定在 z 方向加上一个电场,上面的电子的势能降低了 b,且 $|b|\ll|a|$,求能级. (3) 设电子处于基态,突然电场方向转了 120° 而指向位置 2,计算电子仍处于基态的概率.



题图 9.46

解 (1) 取态基矢为 $|1\rangle,|2\rangle,|3\rangle$,则

$$H=\begin{pmatrix}E_0 & -a & -a\\ -a & E_0 & -a\\ -a & -a & E_0\end{pmatrix}$$

解出其本征值,得能级为 $E_{1,2}=E_0+a$(二重简并), $E_3=E_0-2a$.

(2)
$$H=\begin{pmatrix}E_0-b & -a & -a\\ -a & E_0 & -a\\ -a & -a & E_0\end{pmatrix}$$

解出本征值得能级

$$E_1 = E_0 + a$$

$$E_2 = E_0 - \frac{a+b+\sqrt{(a-b)^2+8a^2}}{2}$$

$$E_3 = E_0 - \frac{a+b-\sqrt{(a-b)^2+8a^2}}{2}$$

E_2对应的能级为基态

$$\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{(E_0-E_2-a)^2+2a^2}}\left[(E_0-E_2-a)|1\rangle + a|2\rangle + a|3\rangle\right]$$

(3) 电场方向改变后新基态为

$$\psi_0' = \frac{1}{\sqrt{(E_0-E_2-a)^2+2a^2}}\left[a|1\rangle + (E_0-E_2-a)|2\rangle + a|3\rangle\right]$$

所以电场方向改变后电子仍处于基态的概率为

$$|\langle\psi_0'|\psi_0\rangle|^2 = \left[\frac{2a(E_0-E_2-a)+a^2}{(E_0-E_2-a)^2+2a^2}\right]^2$$

9.47 三粒子系统中的谐振子力相互作用

题 9.47 考虑三个质量为 m 的粒子的一维运动，粒子之间的力是谐振子力，即势为

$$V = \frac{1}{2}k\left[(x_1-x_2)^2+(x_2-x_3)^2+(x_3-x_1)^2\right]$$

(1) 写出系统的 Schrödinger 方程. (2) 将方程变换到质心坐标系中，显然在该坐标系中波函数和能量本征值能精确地求出. (3) 利用(2)求出粒子为全同 Bose 子时的基态能量. (4) 若三个粒子为自旋$\frac{1}{2}$的 Fermi 子，则基态能量是多少?

解 (1)

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(\sum_{i=1}^{3}\frac{p_i^2}{2m}+V\right)\psi$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}+\frac{\partial^2}{\partial x_3^2}\right)\psi + \frac{k}{2}\left[(x_1-x_2)^2+(x_2-x_3)^2+(x_3-x_1)^2\right]\psi$$

(2) 用 Jacobi 坐标

$$\begin{cases} y_1 = x_1 - x_2 \\ y_2 = \dfrac{x_1+x_2}{2} - x_3 \\ y_3 = \dfrac{x_1+x_2+x_3}{3} \end{cases}$$

则可得

$$\begin{cases} x_1 = y_3 + \dfrac{y_1}{2} + \dfrac{y_2}{3} \\ x_2 = y_3 - \dfrac{y_1}{2} + \dfrac{y_2}{3} \\ x_3 = y_3 - \dfrac{2}{3} y_2 \end{cases}$$

于是

$$V = \frac{k}{2}\left(\frac{3}{2}y_1^2 + 2y_2^2\right)$$

$$\sum_{i=1}^{3}\frac{p_i^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{3}\cdot\frac{\partial^2}{\partial y_3^2} + 2\frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{3}{2}\cdot\frac{\partial^2}{\partial y_2^2}\right)$$

定态方程为

$$E_T\psi = -\frac{\hbar^2}{6m}\cdot\frac{\partial^2\psi}{\partial y_3^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\left(2\frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{3}{2}\cdot\frac{\partial^2}{\partial y_2^2}\right)\psi + \frac{k}{2}\left(\frac{3}{2}y_1^2 + 2y_2^2\right)\psi$$

显然，可分离变量，令

$$\psi = Y(y_3)\phi(y_1, y_2)$$

则

$$\begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{6m}\cdot\dfrac{\partial^2 Y}{\partial y_3^2} = E_c Y \\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\left(2\dfrac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \dfrac{3}{2}\cdot\dfrac{\partial^2}{\partial y_2^2}\right)\phi + \dfrac{k}{2}\left(\dfrac{3}{2}y_1^2 + 2y_2^2\right)\phi = E\phi \end{cases}$$

其中 E_c 为质心运动能量，$E_T = E + E_c$．于是

$$\begin{cases} Y = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i\sqrt{6mE_c}y_3/\hbar} \\ E = \left(n + \dfrac{1}{2}\right)\hbar\sqrt{\dfrac{3k}{m}} + \left(l + \dfrac{1}{2}\right)\hbar\sqrt{\dfrac{3k}{m}} = E_1 + E_2 \\ \phi = \phi_1(y)\phi_2(y) \end{cases}$$

其中 ϕ_1，ϕ_2 为谐振子解，满足下列方程

$$\begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{m}\cdot\dfrac{\partial^2\phi_1}{\partial y_1^2} + \dfrac{3}{4}ky_1^2\phi_1 = E_1\phi_1 \\ -\dfrac{3\hbar^2}{4m}\cdot\dfrac{\partial^2}{\partial y_2^2} + ky_2^2\phi_2 = E_2\phi_2 \end{cases}$$

(3) 令$\alpha^2=\dfrac{m\omega}{\hbar}$，设$\phi_{1n}$、$\phi_{2m}$分别为$\phi_1$、$\phi_2$的$n$能级与$m$能级的波函数. 则$\phi_1$，$\phi_2$的基态波函数分别为

$$\phi_{10}(y_1)=\left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/4}\sqrt{\alpha}\exp\left(-\frac{1}{4}\alpha^2y_1^2\right)$$

$$\phi_{20}(y_2)=\left(\frac{2}{3\pi}\right)^{1/4}\sqrt{\alpha}\exp\left(-\frac{1}{3}\alpha^2y_2^2\right)$$

$$\phi_{10}(y_1)\phi_{20}(y_2)=\left(\frac{1}{3\pi^2}\right)^{1/4}\alpha\exp\left[-\alpha^2\left(\frac{1}{4}y_1^2+\frac{1}{3}y_2^2\right)\right]$$

$$\begin{aligned}3y_1^2+4y_2^2&=3(x_1-x_2)^2+(x_1+x_2-2x_3)^2\\&=4(x_1^2+x_2^2+x_3^2-x_1x_2-x_2x_3-x_3x_1)\end{aligned}$$

因此空间波函数关于粒子交换对称，则三个 Bose 子的基态能量为(质心的平动能量未计入)

$$E_0=\frac{1}{2}\hbar\sqrt{\frac{3k}{m}}+\frac{1}{2}\hbar\sqrt{\frac{3k}{m}}=\hbar\sqrt{\frac{3k}{m}}$$

(4) 三个自旋为 1/2 的 Fermi 子. 由于 Hamilton 量中无自旋项，因此本征态的波函数可分成自旋波函数与空间波函数的乘积.

注意(2)中的坐标变换. 我们还可用下列坐标变换

$$\begin{cases}y_1'=x_2-x_3\\[2mm] y_2'=\dfrac{x_2+x_3}{2}-x_1\\[2mm] y_3'=\dfrac{x_1+x_2+x_3}{3}\end{cases}$$

显然，结果与(2)相同. 本征波函数(空间部分)及能量分别为

$$\begin{cases}\psi(y_1',y_2',y_3')=\phi_{1n}(y_1')\phi_{2l}(y_2')Y(y_3')\\[2mm] E=(n+l+1)\hbar\sqrt{\dfrac{3k}{m}}\end{cases}$$

易知，$\phi_{10}(y_1)\phi_{20}(y_2)=\phi_{10}(y_1')\phi_{20}(y_2')$，因此，此时空间波函数一定关于粒子交换对称，而三个自旋 1/2 的 Fermi 子，却不能构成关于粒子交换反称的自旋波函数. 由此可知，三个自旋 1/2 的 Fermi 子不能形成此态.

注意到谐振子波函数的特点，可以知道，$\phi_{1n}(y_1)\phi_{2l}(y_2)$的指数部分与$\phi_{10}(y_1)\phi_{20}(y_2)$相同，是对称的，令

$$\Phi_1=\phi_{11}(y_1)\phi_{20}(y_2)=C(x_1-x_2)$$

$$\Phi_2=\phi_{11}(y_1')\phi_{20}(y_2')=C(x_2-x_3)$$

C 关于粒子交换对称. 构造波函数$(\Phi_2+\Phi_1=C(x_1-x_3))$

$$\Phi=\Phi_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_3+\Phi_2\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_3-(\Phi_2+\Phi_1)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_3$$

容易验证，Φ 关于粒子交换反对称. 所以，三个自旋$\frac{1}{2}$ Fermi 子的基态能量为(仍未计质心平动能量)

$$E_0=2\hbar\sqrt{\frac{3k}{m}}$$

第 10 章　量子信息物理学

10.1　球谐函数的叠加态

题 10.1　设体系处于态$|\psi\rangle = c_1Y_{11} + c_2Y_{10}, |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$．$Y_{lm}$是球谐函数．利用测量公式考虑：当对此态进行角动量的测量时，(1) 得到L_z的可能值、相应概率，以及平均值分别是多少？(2) 得到L^2的可能值、相应概率分别是多少？(3) 得到L_x和L_y的可能值，以及平均值分别是多少？

解　一个算符A在态ψ中可能的测量值，即为将ψ用A的本征态展开时，各本征态相应的本征值．相应的概率即展开式中本征态前面系数的模平方．Y_{lm}是L_z、L^2的共同本征态

$$\begin{cases} L_zY_{lm} = m\hbar Y_{lm} \\ L^2Y_{lm} = l(l+1)\hbar^2Y_{lm} \end{cases}$$

(1) L_z的可能测量值为$\hbar$和 0，相应的概率分别为$|c_1|^2$和$|c_2|^2$，平均值为$|c_1|^2\hbar$．

(2) L^2的可能测量值皆为$2\hbar^2$，相应的概率为$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$．

(3) 角动量量子数l不变的 Hilbert 空间，可以由三组各自独立完备的基矢Y_{lm}、$Y_{lm'}$、$Y_{lm''}$构成．这三组基分别为(L^2, L_z)、(L^2, L_x)、(L^2, L_y)的共同本征态．l确定后，m, m', m''只能取$-l, -l+1, \cdots, l-1, l$．所以本题中L_x、L_y的可能测量值为0、$\pm\hbar$；平均值分别为$\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\left(c_1^*c_2 + c_1c_2^*\right)$、$\frac{\hbar}{\sqrt{2}i}\left(c_1^*c_2 - c_1c_2^*\right)$．

提示　求$\langle\psi|L_x|\psi\rangle, \langle\psi|L_y|\psi\rangle$时可用$L_\pm$将$L_x, L_y$表示出来，便于计算．

10.2　测量自旋

题 10.2　求在S_z为$+1$的本征态下，(1) 沿$\boldsymbol{n}(\theta,\varphi)$方向测自旋，可能得到的数值分别是多少？(2) 测得自旋沿$\boldsymbol{n}(\theta,\varphi)$方向的概率是多少？(3) 测得自旋沿$-\boldsymbol{n}(\theta,\varphi)$方向的概率又是多少？

解　(1) 将$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$用 Pauli 矩阵表示，得到如下表示

$$\sigma_n = \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{n} = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$$

其本征值为±1，对应的本征矢为

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} \end{pmatrix}, \qquad \chi_- = \begin{pmatrix} -\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi} \\ \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

电子处于态 $\chi_{1/2}(\sigma_z=1)=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ 上，故 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$ 的可能测量值有两个：±1.

(2) 不妨令 $|\alpha\rangle=\chi_{1/2}(\sigma_z=1)=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$，则有

$$p_{n\alpha}=\langle\alpha|\frac{1}{2}(1+\sigma_n)|\alpha\rangle=\frac{1}{2}(1+\cos\theta)=\cos^2\frac{1}{2}\theta$$

即为测得自旋沿 $\boldsymbol{n}(\theta,\varphi)$ 方向的概率.

(3) 同理可求，测得自旋沿 $-\boldsymbol{n}(\theta,\varphi)$ 方向的概率为 $\sin^2\frac{1}{2}\theta$.

10.3　Stern-Gerlach 装置对电子自旋态的区分

题 10.3　若入射电子状态不知为下面两者中哪个

$$\rho=\frac{1}{2}(|+z\rangle\langle+z|+|-z\rangle\langle-z|);\qquad |+x\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|+z\rangle+|-z\rangle)$$

问如何用 Stern-Gerlach 装置对它们作区分?

解　将 Stern-Gerlach 磁场转向沿 $+x$ 向. 这时，对前者有两束，对后者则只有向 $+x$ 方向偏转的一束.

10.4　串接的 Stern-Gerlach 装置对 $\frac{1}{2}$ 自旋态的相干分解与叠加

题 10.4　考虑三个 Stern-Gerlach 装置，顺序同轴串接放置的实验. 设第一个与第二个的间距大于第二个与第三个的间距. 第一个的非均匀磁场的方向沿 $+z$ 轴，第二个磁场方向沿 $+x$ 轴，第三个磁场方向又沿 $+z$ 轴. 入射粒子自旋为1/2. 问：

(1) 入射粒子细束沿 $+z$ 方向极化，最后接受屏图像如何?

(2) 若入射束是非极化的，最后接受屏图像又如何?

(3) 在(2)中，若将第二个装置 $+x$ 方向的 S-G 磁场逐渐关闭，最后接受屏上的图像又如何变化?

答　这是接连三次概率幅的相干分解，再相干叠加或测量塌缩.

(1) 接受屏上有 4 个亮点.

(2) 接受屏上共 8 个亮点，分为两行，每行 4 个.

(3) 接受屏两行亮点 4 对各自相互靠拢. 直到中间 S-G 装置磁场完全消失，并成为两行. 但其中位于中间的 4 个，均因合并时概率幅反号，相干叠加后亮点消失；顶上面一对和最下面一对亮点分别合并，合并时概率幅同号，相干叠加后成为两个更亮的亮点. 最后是两个串接的 $+z$ 方向 S-G 装置结果. 这里注意概率幅展开式中负号所起作用

$$\begin{cases}|+x\rangle=\dfrac{1}{\sqrt{2}}(|+z\rangle+|-z\rangle)\\ |-x\rangle=\dfrac{1}{\sqrt{2}}(|+z\rangle-|-z\rangle)\end{cases},\qquad \begin{cases}|+z\rangle=\dfrac{1}{\sqrt{2}}(|+x\rangle+|-x\rangle)\\ |-z\rangle=\dfrac{1}{\sqrt{2}}(|+x\rangle-|-x\rangle)\end{cases}$$

附带指出，在(3)中变化的全过程里，总强度是守恒的. 因为 8 个光点的每个振幅为 $1/\sqrt{8}$，在合并过程中，有

$$2\left(\frac{1}{\sqrt{8}}+\frac{1}{\sqrt{8}}\right)^2=1$$

10.5 两个全同粒子体系可能状态的数目

题 10.5 考虑由两个全同粒子组成的体系. 设可能的单粒子态为 ϕ_1,ϕ_2,ϕ_3，求体系的可能态的数目 (1) 两粒子为 Bose 子；(2) 两粒子为 Fermi 子；(3) 两粒子为经典粒子.

解 (1) 可能的态有 $\phi_1\phi_1$、$\phi_2\phi_2$、$\phi_3\phi_3$、$\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1\phi_2+\phi_2\phi_1)$、$\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1\phi_3+\phi_3\phi_1)$、$\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_2\phi_3+\phi_3\phi_2)$ 共 6 种；

(2) 可能态有 $\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1\phi_2-\phi_2\phi_1)$、$\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1\phi_3-\phi_3\phi_1)$、$\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_2\phi_3-\phi_3\phi_2)$ 共 3 种；

(3) 经典粒子是可以区分的，所以 $\phi_1\phi_2$ (第一个粒子处于 ϕ_1 态)与 $\phi_2\phi_1$ (第一个粒子处于 ϕ_2 态)不同，故共有 9 种.

10.6 双光子入射分束器后的出射态

题 10.6 设光子分束器入射光子的极化状态更为一般，即输入态改为一般形式

$$|\psi_i\rangle_{12}=\left(\alpha|\leftrightarrow\rangle_1+\beta|\updownarrow\rangle_1\right)\otimes|a\rangle_1\cdot\left(\gamma|\leftrightarrow\rangle_2+\delta|\updownarrow\rangle_2\right)\otimes|b\rangle_2$$

写出相应的输出态、对称化输出态并用 Bell 基将其展开.

解 按通常反射透射各一半，并且反射有 i 位相突变考虑，输出态可写为

$$|\psi_f\rangle_{12}=\left(\alpha|\leftrightarrow\rangle_1+\beta|\updownarrow\rangle_1\right)\otimes\left(i|c\rangle_1+|d\rangle_1\right)\cdot\left(\gamma|\leftrightarrow\rangle_2+\delta|\updownarrow\rangle_2\right)\otimes\left(|c\rangle_2+i|d\rangle_2\right)$$

但假如两个光子同时到达分束器，在出射态中光子的空间模有重叠，就必须考虑两个光子按全同性原理所产生的交换干涉. 这时出射态应该是交换对称的，所以正确的出射态用 Bell 基表示为

$$\begin{aligned}|\psi_f\rangle&=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_f\rangle_{12}+|\psi_f\rangle_{21}\right)\\&=\frac{1}{2}\Big\{(\alpha\gamma+\beta\delta)|\phi^+\rangle_{12}\cdot i\left(|c\rangle_1|c\rangle_2+|d\rangle_1|d\rangle_2\right)-(\alpha\gamma-\beta\delta)|\phi^-\rangle_{12}\cdot i\left(|c\rangle_1|c\rangle_2+|d\rangle_1|d\rangle_2\right)\\&\quad+(\alpha\delta+\beta\gamma)|\psi^+\rangle_{12}\cdot i\left(|c\rangle_1|c\rangle_2+|d\rangle_1|d\rangle_2\right)+(\alpha\delta-\beta\gamma)|\psi^-\rangle_{12}\cdot\left(|c\rangle_1|d\rangle_2-|d\rangle_1|c\rangle_2\right)\Big\}\end{aligned}$$

式中

$$|\phi^\pm\rangle_{12}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\updownarrow\rangle_1|\updownarrow\rangle_2\pm|\leftrightarrow\rangle_1|\leftrightarrow\rangle_2\right)$$

$$|\psi^\pm\rangle_{12}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\updownarrow\rangle_1|\leftrightarrow\rangle_2\pm|\leftrightarrow\rangle_1|\updownarrow\rangle_2\right)$$

注意，这四项中第四项的空间模不同于其余三项. 于是可以采用在不同输出口(c 和 d

处)各放置一个探测器进行符合计数来检出这一项——其极化模为$|\psi^-\rangle_{12}$. 这样一来，尽管两个光子之间(以及分束器中)并不存在可以令光子极化状态发生改变的相互作用，但全同性原理的交换作用和测量塌缩还是使两个光子的极化状态产生了纠缠. 就是说，如此的测量造成了这般的塌缩，使得两个光子中每一个的极化矢量都不再守恒(尽管表面看来不存在改变入射光子极化状态的作用). 现在这两个光子已经不可分辨，这是由于这种测量实验造成的. 说明这种符合测量的塌缩末态和光子极化本征态是不兼容的. 如果设想换另外一种测量实验：在输出口 c 和 d 处均放置极化灵敏的探测器来测量出射光子的极化本征态，则由于分束器过程，以及最后测量向末态塌缩时，极化矢量一直守恒，实验中两个光子就可以用它们极化状态来分辨，相应地也就不出现交换效应. 这个例子再一次说明，两个光子究竟可否分辨，不仅要看物理过程，还要看如何测量——末态如何选择而定.

10.7　对 Dirac“每个光子只能和自己发生干涉”论断的分析

题 10.7　Dirac 在其名著《量子力学原理》一书中说：

“Each photon then interferes only with itself. Interference between two different photons never occurs.” (p.9)

有人做出两个光子在一定条件下的确可以发生干涉的实验. 但 1997 年 8 月 4~7 日，在 University of Maryland 曾举办过主题为 “Fundamental Problems in Quantum Theory” 的 Workshop. 其中有人评论已做出的实验，说该实验是 “1+1 is not 2”. 并在引用 Dirac 这段话之后说：“Dirac was correct.”

根据全同性原理，应当怎样看待这个争论?

解　Dirac 的提法并不正确. 全同性原理就主张，两个或多个全同粒子之间也能发生干涉. 原理主张，一旦它们由于直接或间接相互作用而发生量子纠缠，或是空间波包因演化而发生重叠，使总波函数对称化或反称化，加之在包括观测过程在内的全过程中不存在可分辨的某种物理量，这种对称化或反称化就会在这类观测中表现出来，导致交换作用的干涉效应，这就是根源于全同性原理的全同粒子之间的干涉效应. 综上知 Dirac 的提法并不正确.

10.8　用直积方法实现单 qubit 的 POVM

题 10.8　对于单 qubit A 如下一个 POVM

$$F_\alpha = \frac{2}{3}|\boldsymbol{n}_\alpha\rangle\langle\boldsymbol{n}_\alpha|, \qquad \alpha = 1,2,3, \qquad \boldsymbol{n}_1 + \boldsymbol{n}_2 + \boldsymbol{n}_3 = 0$$

也可以用张量积的方式来实现. 办法是再添一个 qubit B，并且在 $H_A \otimes H_B$ 空间中选择态矢

$$\begin{cases} |\phi_\alpha\rangle = \sqrt{\dfrac{2}{3}}|\boldsymbol{n}_\alpha\rangle_A|0\rangle_B + \sqrt{\dfrac{1}{3}}|0\rangle_A|1\rangle_B, \qquad \alpha = 1,2,3 \\ |\phi_0\rangle = |1\rangle_A|1\rangle_B \end{cases}$$

设初态为 $\rho_{AB} = \rho_A \otimes |0\rangle_{BB}\langle 0|$，验证 (1) 这四个态是正交归一的，可以看作是相应某组力学量的一个表象. (2) 在 $H_A \otimes H_B$ 中执行向它们投影的正交测量，在 H_A 上就实现了给定的

POVM.

证明 (1) 由$\boldsymbol{n}_1+\boldsymbol{n}_2+\boldsymbol{n}_3=0$得：$\left(\boldsymbol{n}_i+\boldsymbol{n}_j\right)^2=1$ 即$\boldsymbol{n}_i\cdot\boldsymbol{n}_j=-\dfrac{1}{2}$，$\forall i\neq j$

$$|\phi_\alpha\rangle=\sqrt{\frac{2}{3}}|\boldsymbol{n}_\alpha\rangle_A|0\rangle_B+\sqrt{\frac{1}{3}}|0\rangle_A|1\rangle_B$$

这里

$$\langle\boldsymbol{n}_\alpha|\boldsymbol{n}_\beta\rangle=|\langle\boldsymbol{n}_\alpha|\boldsymbol{n}_\beta\rangle|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_{\alpha\beta}}=\sqrt{\frac{1+\boldsymbol{n}_\alpha\cdot\boldsymbol{n}_\beta}{2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_{\alpha\beta}}=\frac{1}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_{\alpha\beta}}$$

当$\alpha\neq\beta$时

$$\langle\boldsymbol{n}_\alpha|\boldsymbol{n}_\beta\rangle=-\frac{1}{2}$$

由上述关系易验证题中所给出的四个态正交

$$\langle\phi_\alpha|\phi_\beta\rangle=\frac{2}{3}\langle\boldsymbol{n}_\alpha|\boldsymbol{n}_\beta\rangle+\frac{1}{3}=\frac{2}{3}\left(-\frac{1}{2}\right)+\frac{1}{3}=0$$

(2) 设系统处于$\rho_{AB}=\rho_A\otimes|0\rangle_{B\,B}\langle0|$描述的态中. 对系统作正交投影测量，有

$$\langle\phi_\alpha|\rho_{AB}|\phi_\beta\rangle=\frac{2}{3}\langle\boldsymbol{n}_\alpha|\rho_A|\boldsymbol{n}_\beta\rangle=\mathrm{Tr}\left(\frac{2}{3}|\boldsymbol{n}_\alpha\rangle\langle\boldsymbol{n}_\alpha|\rho_A\right)=\mathrm{Tr}(F_\alpha\rho_A)$$

10.9 用直和方法实现单 qubit 的 POVM

题 10.9 证明上题的 POVM 也能以直和的办法，在一个三能级系统上的正交测量中实现.

证明 在$\{|0\rangle,|1\rangle,|2\rangle\}$中定义正交归一基

$$|u_\alpha\rangle=\sqrt{\frac{2}{3}}|\boldsymbol{n}_\alpha\rangle+\sqrt{\frac{1}{3}}|\boldsymbol{n}_\beta\rangle,\qquad\langle\boldsymbol{n}_\alpha|\boldsymbol{n}_\beta\rangle=-\frac{1}{2}$$

式中，$|\boldsymbol{n}_\alpha\rangle$定义在三维 Hilbert 空间里由$|0\rangle$、$|1\rangle$张成的子空间上. 则系统$A$在扩大的三维直和空间的密度矩阵为

$$\rho_3=\begin{pmatrix}\rho_A&0\\0&0\end{pmatrix}$$

三维空间中的正交投影测量可得

$$\langle u_\alpha|\rho_3|u_\alpha\rangle=\frac{2}{3}\langle\boldsymbol{n}_\alpha|\rho_A|\boldsymbol{n}_\beta\rangle=\mathrm{Tr}\left(\frac{2}{3}|\boldsymbol{n}_\alpha\rangle\langle\boldsymbol{n}_\alpha|\rho_A\right)=\mathrm{Tr}(F_\alpha\rho_A)$$

10.10 单 qubit 的 POVM 及如何利用双 qubit 的正交测量来实现该 POVM

题 10.10 给定如下一组正算符

$$p_1=\frac{1}{2}|+\boldsymbol{e}_z\rangle\langle+\boldsymbol{e}_z|,\quad p_2=\frac{1}{2}|-\boldsymbol{e}_z\rangle\langle-\boldsymbol{e}_z|,\quad p_3=\frac{1}{2}|+\boldsymbol{e}_x\rangle\langle+\boldsymbol{e}_x|,\quad p_4=\frac{1}{2}|-\boldsymbol{e}_x\rangle\langle-\boldsymbol{e}_x|$$

证明 (1) 它们组成一个 POVM；(2) 在引入另一个 qubit 之后，它怎样可以作为双 qubit 的态空间中一个正交测量来实现.

证明　(1)由于

$$p_1+p_2+p_3+p_4=\frac{1}{2}\left(|+e_z\rangle\langle+e_z|+|-e_z\rangle\langle-e_z|\right)+\frac{1}{2}\left(|+e_x\rangle\langle+e_x|+|-e_x\rangle\langle-e_x|\right)=I$$

所以$\{p_i,i=1,2,3,4\}$具有完备性；另外容易看出$p_i^\dagger=p_i$；最后还有

$$\langle\psi|p_i|\psi\rangle\geqslant 0$$

综上所述，$\{p_i\}$Hermite、正定、构成单位算符的分解，组成一个 POVM.

(2) 先构成 2 qubit 的四维 Hilbert 空间，其 4 个正交归一基矢为

$$\begin{cases}|u_1\rangle=|+e_z\rangle_A|+e_z\rangle_B, & |u_2\rangle=|-e_z\rangle_A|+e_z\rangle_B\\ |u_3\rangle=|+e_x\rangle_A|-e_z\rangle_B, & |u_4\rangle=|-e_x\rangle_A|-e_z\rangle_B\end{cases}$$

设四维空间的密度矩阵为

$$\rho_4=\rho_A\otimes\frac{1}{2}\left(|e_z\rangle_{B\,B}\langle e_z|+|-e_z\rangle_{B\,B}\langle-e_z|\right)$$

四维空间作正交投影测量，则有

$$\langle u_1|\rho_4|u_1\rangle={}_B\langle e_z|\,{}_A\langle e_z|\rho_A\otimes\frac{1}{2}\left(|e_z\rangle_{B\,B}\langle e_z|+|-e_z\rangle_{B\,B}\langle-e_z|\right)|e_z\rangle_A|+e_z\rangle_B$$

$$={}_A\langle e_z|\frac{1}{2}\rho_A|e_z\rangle_A=\mathrm{Tr}\left(\frac{1}{2}|e_z\rangle_{A\,A}\langle e_z|\rho_A\right)=\mathrm{Tr}(p_1\rho_A)$$

同理有

$$\langle u_i|\rho_4|u_i\rangle=\mathrm{Tr}(p_i\rho_A)$$

10.11　超算符独立实参数的数目以及超算符与密度矩阵的一一对应

题 10.11　一般的超算符$\$:\boldsymbol{\rho}\to\boldsymbol{\rho}'$ 需要多少个实参数来表示？这里$\boldsymbol{\rho}$是d维 Hilbert 空间中的一个密度矩阵.

解　设$\$(\rho_A)=\rho_A'$是$d$维 Hilbert 空间$H_A$中的任意一个超算符. 可以证明，$H_A$中的超算符$\$$和扩展 Hilbert 空间$H_A\otimes H_B$中满足$\mathrm{Tr}_A\boldsymbol{\rho}_{AB}=I/d$的密度矩阵$\boldsymbol{\rho}_{AB}$是一一对应的. 而满足上式的$\boldsymbol{\rho}_{AB}$的自由度为$d^4-d^2$，即$\boldsymbol{\rho}_{AB}$中有$d^4-d^2$个实参数.

下面证明这种一一对应. 首先，给定一个超算符$\$$，则可以通过如下方式将它对应为一个密度矩阵$\boldsymbol{\rho}_{AB}$

$$\boldsymbol{\rho}_{AB}=\$\otimes I_B\left(|\Phi\rangle\langle\Phi|\right)$$

式中，$|\Phi\rangle=\frac{1}{\sqrt{d}}\sum_i|i\rangle_A|i'\rangle_B$. 由于$\$(|i\rangle\langle j|)=\delta_{ij}$，因此有

$$\mathrm{Tr}_A\boldsymbol{\rho}_{AB}=\mathrm{Tr}_A\$\otimes I_B\left(|\Phi\rangle\langle\Phi|\right)=\frac{1}{d}\sum_{ij}\left[\mathrm{Tr}\$(|i\rangle\langle j|)\right]|i\rangle\langle j|=\frac{I}{d}$$

反之，若给定满足$\mathrm{Tr}_A\boldsymbol{\rho}_{AB}=I/d$的密度矩阵$\boldsymbol{\rho}_{AB}$，设其谱分解为

$$\boldsymbol{\rho}_{AB}=\sum_i p_i|\Psi_i\rangle\langle\Psi_i|$$

$|\Psi_i\rangle=\sum_{mn}C_{mn}^i|m\rangle_A|n\rangle_B$可以写为$|\Psi_i\rangle=C_i\otimes I_B|\Phi\rangle$，其中$C_i$为$H_A$中的算符，由下式定义

$$_A\langle m|C_i|n\rangle_A=\sqrt{d}C^i_{mn}$$

于是我们得到

$$\rho_{AB}=\sum_i p_iC_i\otimes I_B|\Phi\rangle\langle\Phi|C_i^\dagger\otimes I_B\equiv\$\otimes I_B(|\Phi\rangle\langle\Phi|)$$

式中，线性映射$\$$定义如下

$$\$(\rho)=\sum_i p_iC_i\rho C_i^\dagger=d\mathrm{Tr}_B(\rho^{\mathrm{T}}\rho_{AB})$$

式中，ρ是定义在H_B空间中的密度矩阵. 既然ρ_{AB}是正算符，可看出由上式定义的$\$$是一个完全正算符（超算符）. 由于$\mathrm{Tr}_A\rho_{AB}=I/d$，因此

$$\mathrm{Tr}_A\left(\sum_i p_iC_i^\dagger C_i\otimes I_B|\Phi\rangle\langle\Phi|\right)=\frac{I}{d}$$

但是，由于对于任意算符X，有$X\otimes I|\Phi\rangle=I\otimes X^T|\Phi\rangle$，因此易见上面式子左边为

$$\frac{1}{d}\left(\sum_i p_iC_i^\dagger C_i\right)^{\mathrm{T}}$$

于是得到

$$\sum_i p_iC_i^\dagger C_i=I$$

以及

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}_A\rho_{AB}&=\mathrm{Tr}_A\sum_i p_iC_i\otimes I_B|\Phi\rangle\langle\Phi|C_i^\dagger\otimes I_B\\&=\frac{1}{d}\sum_{mn}|n\rangle_{B\,B}\langle m|\;_A\langle m|\sum_i p_iC_i^\dagger C_i|n\rangle_A\\&=\frac{1}{d}\sum_{mn}|n\rangle_{B\,B}\langle m|\;_A\langle m|n\rangle_A\\&=\frac{1}{d}\sum_n|n\rangle_{B\,B}\langle n|\\&=\frac{I}{d}\end{aligned}$$

10.12 Fock 空间中的等距算符

题 10.12 定义 Fock 空间的一个算符Ω：$|n\rangle\to|n+1\rangle$，$n=0,1,2,\cdots$. 证明这是一个等距算子. 就是说，它满足$\Omega^\dagger\Omega=I$，$\Omega\Omega^\dagger\neq I$. 求出第二个表达式等于什么.

证明 由题意得

$$\Omega=\sum_{n=0}^{\infty}|n+1\rangle\langle n|$$

因为

$$\Omega^\dagger\Omega=\sum_{m=0}^{\infty}|m\rangle\langle m+1|\sum_{n=0}^{\infty}|n+1\rangle\langle n|=\sum_{n=0}^{\infty}|n\rangle\langle n|=I$$

所以

$$\langle\Psi|\Omega^{\dagger}\Omega|\Psi\rangle=\langle\Psi|\Psi\rangle$$

上式说明Ω是一个等距算符，不改变任何态$|\Psi\rangle$的标积. 但是

$$\Omega\Omega^{\dagger}=\sum_{n=0}^{\infty}|n+1\rangle\langle n|\sum_{m=0}^{\infty}|m\rangle\langle m+1|=\sum_{n=1}^{\infty}|n\rangle\langle n|=I-|0\rangle\langle 0|\neq I$$

故Ω并非幺正算符.

10.13　转置是正映射，但不是完全正的映射

题 10.13　证明：转置映射T是个正映射，但不是一个完全正的映射.

解　设H_A和H_B的维数都为d. 考虑$H_A\otimes H_B$空间的最大纠缠态

$$|\phi^{+}\rangle_{AB}=\frac{1}{\sqrt{d}}\sum_{i=1}^{d}|i\rangle_A\otimes|i\rangle_B$$

以及

$$\rho_{AB}\equiv|\phi^{+}\rangle_{AB\,AB}\langle\phi^{+}|=\frac{1}{d}\sum_{ij}|i\rangle_{A\,A}\langle j|\otimes|i\rangle_{B\,B}\langle j|$$

$T_A\otimes I_B$作用到ρ_{AB}上后得

$$V_{AB}\equiv T_A\otimes I_B\rho_{AB}=\frac{1}{d}\sum_{ij}|j\rangle_{A\,A}\langle i|\otimes|i\rangle_{B\,B}\langle j|$$

很易算得V_{AB}的本征值为$\pm1/d$，因此V_{AB}不是一个正算符，这意味着T不是一个完全正的映射.

10.14　二维量子态的 Bloch 球表示

题 10.14　任何两维纯态$|\psi\rangle$必定对应于单位球面上的某一点，因为它的密度矩阵总可以表示为$\boldsymbol{\rho}=|\psi\rangle\langle\psi|=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})$，这里$\boldsymbol{n}$是单位球面上某一点的矢径；任何两维混态必定对应于单位球面内的某一点，因为它的密度矩阵总可以写为$\boldsymbol{\rho}=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\sigma})$，这里$|\boldsymbol{p}|<1$（由于$\det\boldsymbol{\rho}=\frac{1}{4}(1-\boldsymbol{p}^2)$，根据$\boldsymbol{\rho}$的本征值为非负的要求，必有$|\boldsymbol{p}|<1$）. 这便是二维量子态的Bloch 球表示. 现在要求在 Bloch 球上表示下述态

$$|\psi\rangle=\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|0\rangle+\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\mathrm{e}^{i\phi}|1\rangle$$

$$\rho=\frac{1}{2}\left[|0\rangle\langle 0|+|1\rangle\langle 1|+(x+\mathrm{i}y)|0\rangle\langle 1|+(x-\mathrm{i}y)|1\rangle\langle 0|\right]$$

解　对于前者是纯态，由于

$$|0\rangle\langle 0|=\frac{1-\sigma_3}{2},\quad |1\rangle\langle 1|=\frac{1+\sigma_3}{2},\quad |0\rangle\langle 1|=\frac{\sigma_1-\mathrm{i}\sigma_2}{2},\quad |1\rangle\langle 0|=\frac{\sigma_1+\mathrm{i}\sigma_2}{2}$$

故有

$$\rho=|\psi\rangle\langle\psi|=\sin^2\frac{\theta}{2}|0\rangle\langle 0|+\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}|1\rangle\langle 0|+\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}|0\rangle\langle 1|+\cos^2\frac{\theta}{2}|1\rangle\langle 1|$$

$$=\frac{1}{2}(1+\sin\theta\cos\phi\sigma_1-\sin\theta\sin\phi\sigma_2+\cos\theta\sigma_3)=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})$$

式中

$$\boldsymbol{n}=(\sin\theta\cos\phi,-\sin\theta\sin\phi,\cos\theta),\qquad \text{Euler 角为}(\theta,-\phi)$$

对于后者为混态

$$\rho=\frac{1}{2}\left[\frac{1-\sigma_3}{2}+\frac{1+\sigma_3}{2}+(x+\mathrm{i}y)\frac{\sigma_1-\mathrm{i}\sigma_2}{2}+(x-\mathrm{i}y)\frac{\sigma_1+\mathrm{i}\sigma_2}{2}\right]=\frac{1}{2}(1+\sigma_1 x+\sigma_2 y)$$

所以 $\boldsymbol{p}=(x,y,0)$.

10.15　任意二维混态ρ表示为两个纯态的凸性和

题 10.15　利用 Bloch 球证明 (1) 任何二维混态 ρ 总可以表示为两个纯态的如下凸性和

$$\rho=\lambda\rho_A+(1-\lambda)\rho_B$$

这里 $\rho_A=|A\rangle\langle A|,\rho_B=|B\rangle\langle B|$ 是两个纯态，λ 是某个小于 1 的正数. (2) 给出极化矢量的相应分解表示式. (3) 这种表示方法不是唯一的. 说明混态的纯态系综表示是含混的.

证明　(1) ρ 的本征分解

$$\rho=\lambda_1|\phi_1\rangle\langle\phi_1|+\lambda_2|\phi_2\rangle\langle\phi_2|$$

给出了形如

$$\lambda\rho_A+(1-\lambda)\rho_B$$

的凸组合 $(\lambda_1+\lambda_2=1)$.

(2) $\boldsymbol{p}=\lambda_1\boldsymbol{n}_1+\lambda_2\boldsymbol{n}_2$，式中

$$\rho=\frac{1+\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{2},\qquad |\phi_i\rangle\langle\phi_i|=\frac{1+\boldsymbol{n}_i\cdot\boldsymbol{\sigma}}{2}$$

(3) 对于任意单位矢量 $\boldsymbol{m}$，定义

$$\boldsymbol{n}=\boldsymbol{p}+\frac{1-|\boldsymbol{p}|^2}{|\boldsymbol{m}-\boldsymbol{p}|^2}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{m})$$

则 $|\boldsymbol{n}|^2=1$，且

$$\boldsymbol{p}=\lambda\boldsymbol{m}+(1-\lambda)\boldsymbol{n},\qquad \lambda=\frac{1-|\boldsymbol{p}|^2}{2(1-\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{p})},\qquad 0\leqslant\lambda\leqslant 1$$

于是

$$\rho=\lambda|\phi_m\rangle\langle\phi_m|+(1-\lambda)|\phi_n\rangle\langle\phi_n|$$

式中

$$|\phi_m\rangle\langle\phi_m| = \frac{1+\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{2}, \qquad |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = \frac{1+\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{2}$$

10.16　对二维密度矩阵ρ_A, ρ_B，计算 $\mathrm{Tr}(\rho_A\rho_B)$

题 10.16　对二维密度矩阵$\rho_A = \frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}_A\cdot\boldsymbol{\sigma})$和$\rho_B = \frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}_B\cdot\boldsymbol{\sigma})$，证明

$$\mathrm{Tr}(\rho_A\rho_B) = \frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}_A\cdot\boldsymbol{n}_B)$$

证明　$\rho_A\rho_B = \frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}_A\cdot\boldsymbol{\sigma})\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}_B\cdot\boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{4}(1+\boldsymbol{n}_A\cdot\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{n}_B\cdot\boldsymbol{\sigma}+(\boldsymbol{n}_A\cdot\boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{n}_B\cdot\boldsymbol{\sigma}))$

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}(\rho_A\rho_B) &= \frac{1}{2}+\frac{1}{4}\mathrm{Tr}(\boldsymbol{n}_A\cdot\boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{n}_B\cdot\boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{2}+\frac{1}{4}\mathrm{Tr}[\boldsymbol{n}_A\cdot\boldsymbol{n}_B+\mathrm{i}(\boldsymbol{n}_A\times\boldsymbol{n}_B)\cdot\boldsymbol{\sigma}] \\ &= \frac{1}{2}+\frac{1}{2}\boldsymbol{n}_A\cdot\boldsymbol{n}_B = \frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}_A\cdot\boldsymbol{n}_B)\end{aligned}$$

(以上用到了 $\mathrm{Tr}\sigma_i = 0$).

10.17　单体混态ρ_A可看作两体纯态的约化密度矩阵

题 10.17　给定系统 A 的一个混态 ρ_A，证明它能够作为两体系统 A 和 B 的 Hilbert 空间中某个纯态的约化密度矩阵来得到.

解　假设 ρ_A 的谱表示为 $\rho_A = \sum_i \lambda_i |\psi_i\rangle_{AA}\langle\psi_i|$ 同时假定 Hilbert 空间 B 的基为$|\mu_i\rangle_B$，我们取 AB 共同组成的系统的纯态为

$$|\psi\rangle_{AB} = \sum_i \sqrt{\lambda_i}|\psi_i\rangle_A|\mu_i\rangle_B$$

对 ρ_{AB} 取部分迹，则有

$$\rho_A = \mathrm{Tr}_B(\rho_{AB}) = \sum_k {}_B\langle\mu_k|\sum_{ij}\sqrt{\lambda_i}|\psi_i\rangle_A|\mu_i\rangle_B\sqrt{\lambda_j}\ {}_A\langle\psi_j|\,{}_B\langle\mu_j|\mu_k\rangle_B = \sum_i \lambda_i|\psi_i\rangle_{AA}\langle\psi_i|$$

10.18　von Neumann 熵

题 10.18　求密度矩阵 $\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$, $\rho = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}$, $\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix}$, $\rho = \frac{1}{3}\begin{pmatrix}2 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix}$, $\rho = \begin{pmatrix}1/2 & i/3\\ -i/3 & 1/2\end{pmatrix}$ 的 von Neumann 熵 $S(\rho)$.

解　对于第一个密度矩阵，$S(\rho)=1$. 对于第二个密度矩阵，$S(\rho)=0$. 对于第三个密度矩阵，$S(\rho)=0$. 对于第四个密度矩阵，$S(\rho) = -\left(\frac{3+\sqrt{5}}{6}\log_2\frac{3+\sqrt{5}}{6}+\frac{3-\sqrt{5}}{6}\log_2\frac{3-\sqrt{5}}{6}\right)$. 对于第五个密度矩阵，$S(\rho)=\log_2 6-\frac{5}{6}\log_2 5$.

10.19 求给定的两体密度矩阵的本征值

题 10.19 按均匀概率分布制备以下三个态

$$|\varphi_1\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\quad |\varphi_2\rangle=\begin{pmatrix}-1/2\\ \sqrt{3}/2\end{pmatrix},\quad |\varphi_3\rangle=\begin{pmatrix}-1/2\\ -\sqrt{3}/2\end{pmatrix}$$

$$\rho=\frac{1}{3}\left(\sum_{\alpha=1}^{3}|\Phi_\alpha\rangle_{AB\,AB}\langle\Phi_\alpha|\right),\qquad |\Phi_\alpha\rangle_{AB}=|\varphi_\alpha\rangle_A|\varphi_\alpha\rangle_B,\qquad \alpha=1,2,3$$

求此系综组成的两体密度矩阵的本征值.

解 $|\Phi_1\rangle=|\varphi_1\rangle|\varphi_1\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix}$; $|\Phi_2\rangle=|\varphi_2\rangle|\varphi_2\rangle=\frac{1}{4}\begin{pmatrix}1\\-\sqrt{3}\\-\sqrt{3}\\3\end{pmatrix}$; $|\Phi_3\rangle=|\varphi_3\rangle|\varphi_3\rangle=\frac{1}{4}\begin{pmatrix}1\\ \sqrt{3}\\ \sqrt{3}\\3\end{pmatrix}$

$$\rho=\frac{1}{3}\sum_{\alpha=1}^{3}|\Phi_\alpha\rangle\langle\Phi_\alpha|=\frac{1}{8}\begin{pmatrix}3&0&0&1\\0&1&1&0\\0&1&1&0\\1&0&0&3\end{pmatrix};\qquad \text{本征值为 }\lambda=0,\ \frac{1}{4},\ \frac{1}{4},\ \frac{1}{2}$$

10.20 Bell 基是力学量 $\{\sigma_x^A\sigma_x^B,\ \sigma_y^A\sigma_y^B,\ \sigma_z^A\sigma_z^B\}$ 的共同本征态

题 10.20 求证：4 个 Bell 基 $\{|\psi^\pm\rangle_{AB},\ |\phi^\pm\rangle_{AB}\}$ 是力学量 $\{\sigma_x^A\sigma_x^B,\ \sigma_y^A\sigma_y^B,\ \sigma_z^A\sigma_z^B\}$ 的共同本征态.

解 以 $|\phi^+\rangle_{AB}$ 为例，则因为 $\boldsymbol{S}=\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$ (注意已采取了自然单位制)，又由于

$$\begin{cases}S_x=\dfrac{S_++S_-}{2}\\ S_y=\dfrac{S_+-S_-}{2i}\\ S_z=S_0\end{cases}$$

则

$$\begin{aligned}\sigma_x^A\sigma_x^B|\phi^+\rangle_{AB}&=\sigma_x^A\sigma_x^B\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\frac{1}{2}\right\rangle_A\left|\frac{1}{2}\right\rangle_B+\left|-\frac{1}{2}\right\rangle_A\left|-\frac{1}{2}\right\rangle_B\right)\\&=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(S_{A-}\left|\frac{1}{2}\right\rangle_A S_{B-}\left|\frac{1}{2}\right\rangle_B+S_{A+}\left|-\frac{1}{2}\right\rangle_A S_{B+}\left|-\frac{1}{2}\right\rangle_B\right)\\&=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|-\frac{1}{2}\right\rangle_A\left|-\frac{1}{2}\right\rangle_B+\left|\frac{1}{2}\right\rangle_A\left|\frac{1}{2}\right\rangle_B\right)\end{aligned}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\frac{1}{2}\right\rangle_A\left|\frac{1}{2}\right\rangle_B+\left|-\frac{1}{2}\right\rangle_A\left|-\frac{1}{2}\right\rangle_B\right)$$
$$=\left|\phi^+\right\rangle_{AB}$$

即$\left|\phi^+\right\rangle_{AB}$为$\sigma_x^A\sigma_x^B$的本征态，同理可知其余三个 Bell 基亦为$\sigma_x^A\sigma_x^B$的本征态，又因为

$$\left[\sigma_x^A\sigma_x^B,\sigma_y^A\sigma_y^B\right]=\sigma_x^A\left[\sigma_x^B,\sigma_y^A\sigma_y^B\right]+\left[\sigma_x^A,\sigma_y^A\sigma_y^B\right]\sigma_x^B$$
$$=\sigma_x^A\left(\sigma_y^A\left[\sigma_x^B,\sigma_y^B\right]+\left[\sigma_x^B,\sigma_y^A\right]\sigma_y^B\right)+\left(\sigma_y^A\left[\sigma_x^A,\sigma_y^B\right]+\left[\sigma_x^A,\sigma_y^A\right]\sigma_y^B\right)\sigma_x^B$$
$$=\sigma_x^A\sigma_y^A\left[\sigma_x^B,\sigma_y^B\right]+\left[\sigma_x^A,\sigma_y^A\right]\sigma_y^B\sigma_x^B=2\mathrm{i}\sigma_x^A\sigma_y^A\sigma_z^B+2\mathrm{i}\sigma_z^A\sigma_y^B\sigma_x^B$$
$$=2\mathrm{i}\sigma_x^A\sigma_y^A\sigma_z^B-2\mathrm{i}\sigma_z^A\sigma_x^B\sigma_y^B=-2\sigma_z^A\sigma_z^B+2\sigma_z^A\sigma_z^B=0$$

故最后可知，$\left\{\left|\psi^\pm\right\rangle_{AB},\left|\phi^\pm\right\rangle_{AB}\right\}$是力学量$\left\{\sigma_x^A\sigma_x^B,\ \sigma_y^A\sigma_y^B,\ \sigma_z^A\sigma_z^B\right\}$的共同本征态.

10.21　对给定的两体纯态，求其约化密度矩阵及 Schmidt 分解形式

题 10.21　设$|\Phi\rangle_{AB}=\frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle_A\left(\frac{1}{2}|\uparrow\rangle_B+\frac{\sqrt{3}}{2}|\downarrow\rangle_B\right)+\frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\rangle_A\left(\frac{\sqrt{3}}{2}|\uparrow\rangle_B+\frac{1}{2}|\downarrow\rangle_B\right)$，

求：(1) 约化密度矩阵ρ_A，ρ_B；(2) 作 Schmidt 分解.

解　(1) ρ_B的形式与ρ_A相同，为

$$\rho_A=\frac{1}{8}\left[\left(|\uparrow\rangle_A+\sqrt{3}|\downarrow\rangle_A\right)\left({}_A\langle\uparrow|+\sqrt{3}\,{}_A\langle\downarrow|\right)+\left(\sqrt{3}|\uparrow\rangle_A+|\downarrow\rangle_A\right)\left(\sqrt{3}\,{}_A\langle\uparrow|+{}_A\langle\downarrow|\right)\right].$$

但ρ_A与ρ_B此时不是对角的. 可将之化为对角表示. 可得

$$\rho=\frac{1}{4}\begin{pmatrix}2&\sqrt{3}\\\sqrt{3}&2\end{pmatrix};\qquad \lambda_{1,2}=\frac{1}{4}\left(2\pm\sqrt{3}\right)$$

相应的本征矢量为

$$|\lambda_1\rangle_A=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}_A=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\rangle_A+|\downarrow\rangle_A\right);\qquad |\lambda_2\rangle_A=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}_A=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\rangle_A-|\downarrow\rangle_A\right)$$

解出$|\uparrow\rangle$，$|\downarrow\rangle$代入上面ρ_A表达式，得

$$\rho_A=\frac{2+\sqrt{3}}{4}|\lambda_1\rangle_{A\,A}\langle\lambda_1|+\frac{2-\sqrt{3}}{4}|\lambda_2\rangle_{A\,A}\langle\lambda_2|$$

ρ_B相似.

(2) 于是 Schmidt 分解为

$$|\Phi\rangle_{AB}=\sqrt{\frac{2+\sqrt{3}}{4}}|\lambda_1\rangle_A|\lambda_1\rangle_B-\sqrt{\frac{2-\sqrt{3}}{4}}|\lambda_2\rangle_A|\lambda_2\rangle_B$$

注　可以验证，若此处第二项取正根，则对应态为(与$|\Phi\rangle_{AB}$对照)

$$|\Phi'\rangle_{AB}=\frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle_A\left(\frac{\sqrt{3}}{2}|\uparrow\rangle_B+\frac{1}{2}|\downarrow\rangle_B\right)+\frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\rangle_A\left(\frac{1}{2}|\uparrow\rangle_B+\frac{\sqrt{3}}{2}|\downarrow\rangle_B\right)$$

10.22　三粒子纯态不一定能进行 Schmidt 分解

题 10.22　论证：任意给定的三粒子纯态不一定能进行 Schmidt 分解.

证明　举一个反例即可. 研究下面纯态

$$\begin{cases} |\Phi\rangle_{ABC} = |\varphi\rangle_{AB} \otimes |\omega\rangle_C \\ |\varphi\rangle_{AB} = \sum_{j=1}^{N} \alpha_j |j\rangle_A |j\rangle_B, \quad N > 2 \end{cases}$$

如果能将其写成三体 Schmidt 分解形式，即，如果有

$$|\Phi\rangle_{ABC} = \sum_{i=1}^{M} \sqrt{p_i} |i\rangle_A |i\rangle_B |i\rangle_C, \quad \forall p_i \neq 0$$

则，当 $M > 2$，对粒子 C 求迹后所剩 AB 粒子的态是混态而不是原来假定的纯态；若 $M = 1$，则 $|1\rangle_C = |\omega\rangle_C$，同时 A 和 B 是分离的，这也不符合 $|\varphi\rangle_{AB}$ 是纠缠的假定. 证毕.

10.23　求两 qubit 系统密度矩阵的谱分解和局域测量

题 10.23　已知两 qubit 系统的一个量子态 $\rho_{AB} = \frac{1}{8} I + \frac{1}{2} |\psi^-\rangle\langle\psi^-|$，

(1) 求 ρ_{AB} 的谱分解；

(2) 沿 $\boldsymbol{n}$ 测 $\boldsymbol{\sigma}_A$，沿 $\boldsymbol{m}$ 测 $\boldsymbol{\sigma}_B$，这里 $\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{m} = \cos\theta$，求它们都沿各自相应轴朝上的概率.

解　(1) ρ_{AB} 的矩阵表示为

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{8} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{3}{8} & -\frac{1}{4} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{4} & \frac{3}{8} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{8} \end{pmatrix}$$

由本征方程可解出其本征值为 $\lambda_{1,2,3} = \frac{1}{8}$、$\lambda_4 = \frac{5}{8}$ 进而求得相应的本征态为：$|\phi^+\rangle$；$|\phi^-\rangle$；$|\psi^+\rangle$ 和 $|\psi^-\rangle$. 于是 ρ_{AB} 可以写为

$$\rho_{AB} = \frac{1}{8}\left(|\phi^+\rangle\langle\phi^+| + |\phi^-\rangle\langle\phi^-| + |\psi^+\rangle\langle\psi^+|\right) + \frac{5}{8}|\psi^-\rangle\langle\psi^-|$$

(2)

$$\begin{aligned} P &= \mathrm{Tr}\left[\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}_A)\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{\sigma}_B)\rho_{AB}\right] \\ &= \mathrm{Tr}\left[\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}_A)\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{\sigma}_B)\frac{1}{8}\right] + \mathrm{Tr}\left[\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}_A)\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{\sigma}_B)\frac{1}{2}|\psi^-\rangle\langle\psi^-|\right] \end{aligned}$$

由于

$$\sigma_{A1}\left|\psi^-\right\rangle=\left|\phi^-\right\rangle,\ \sigma_{A2}\left|\psi^-\right\rangle=-\mathrm{i}\left|\psi^+\right\rangle,\ \sigma_{A3}\left|\psi^-\right\rangle=-\left|\phi^+\right\rangle,\ \boldsymbol{\sigma}_A\left|\psi^-\right\rangle=-\boldsymbol{\sigma}_B\left|\psi^-\right\rangle$$

从而得到

$$\begin{cases}\mathrm{Tr}\left(\left|\psi^-\right\rangle\left\langle\psi^-\right|\right)=1\\ \mathrm{Tr}\left(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}_A\left|\psi^-\right\rangle\left\langle\psi^-\right|\right)=\mathrm{Tr}\left(\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{\sigma}_B\left|\psi^-\right\rangle\left\langle\psi^-\right|\right)=0\\ \mathrm{Tr}\left[(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}_A)(\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{\sigma}_B)\left|\psi^-\right\rangle\left\langle\psi^-\right|\right]=-n_im_j\left\langle\psi^-\right|\sigma_{Ai}\sigma_{Aj}\left|\psi^-\right\rangle\\ =-n_im_j\left\langle\psi^-\right|\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k+\delta_{ij}\left|\psi^-\right\rangle=-\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{m}\end{cases}$$

所以有

$$P=\frac{1}{8}+\frac{1}{8}-\frac{1}{8}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{m}=\frac{1}{4}-\frac{1}{8}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{m}$$

10.24　用 Peres 判据判断一个态是否可分 (1)

题 10.24　设 $\rho=\lambda\left|\phi^+\right\rangle\left\langle\phi^+\right|+(1-\lambda)\left|\psi^+\right\rangle\left\langle\psi^+\right|$，$0\leqslant\lambda\leqslant1$. 应用 Peres 判据求转置后矩阵的本征值，判断 λ 为何值时，态是可分离的.

解　经对 A 作部分转置后，为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\rho}_{AB}^{T_A}&={}_A\langle0|\rho_{AB}|0\rangle_A\otimes|0\rangle_{A\,A}\langle0|+{}_A\langle1|\rho_{AB}|1\rangle_A\otimes|1\rangle_{A\,A}\langle1|\\&\quad+{}_A\langle0|\rho_{AB}|1\rangle_A\otimes|1\rangle_{A\,A}\langle0|+{}_A\langle1|\rho_{AB}|0\rangle_A\otimes|0\rangle_{A\,A}\langle1|\\&=\frac{1}{2}\Big[\lambda|0\rangle_{B\,B}\langle0|\otimes|0\rangle_{A\,A}\langle0|+(1-\lambda)|0\rangle_{B\,B}\langle0|\otimes|0\rangle_{A\,A}\langle0|\\&\quad+\lambda|0\rangle_{B\,B}\langle0|\otimes|0\rangle_{A\,A}\langle0|+(1-\lambda)|0\rangle_{B\,B}\langle0|\otimes|0\rangle_{A\,A}\langle0|\\&\quad+\lambda|0\rangle_{B\,B}\langle0|\otimes|0\rangle_{A\,A}\langle0|+(1-\lambda)|0\rangle_{B\,B}\langle0|\otimes|0\rangle_{A\,A}\langle0|\\&\quad+\lambda|0\rangle_{B\,B}\langle0|\otimes|0\rangle_{A\,A}\langle0|+(1-\lambda)|0\rangle_{B\,B}\langle0|\otimes|0\rangle_{A\,A}\langle0|\Big]\\&=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}\lambda&0&0&(1-\lambda)\\0&(1-\lambda)&\lambda&0\\0&\lambda&(1-\lambda)&0\\(1-\lambda)&0&0&\lambda\end{pmatrix}\end{aligned}$$

后面矩阵表示是在 $\{|00\rangle_{AB},|01\rangle_{AB},|10\rangle_{AB},|11\rangle_{AB}\}$ 基底中写出的. 求其本征值，得 $x_1,x_2=\frac{1}{2},x_3=\lambda-\frac{1}{2},x_4=-\left(\lambda-\frac{1}{2}\right)$. 当 $\lambda(0\leqslant\lambda\leqslant1)\neq\frac{1}{2}$ 时，有负本征值，按 Peres 判据是纠缠的；而当 $\lambda=\frac{1}{2}$ 时，$\rho_{AB}^{T_A}=\frac{1}{2}\left(\left|\phi^+\right\rangle\left\langle\phi^+\right|+\left|\psi^+\right\rangle\left\langle\psi^+\right|\right)$，是个混态可分离态

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\rho}_{AB}^{T_A}&=\frac{1}{2}\left(\left|\phi^+\right\rangle\left\langle\phi^+\right|+\left|\psi^+\right\rangle\left\langle\psi^+\right|\right)\\&=\frac{1}{4}\Big[\left(|0\rangle_A+|1\rangle_A\right)\left({}_A\langle0|+{}_A\langle1|\right)\otimes\left(|0\rangle_B+|1\rangle_B\right)\left({}_B\langle0|+{}_B\langle1|\right)\end{aligned}$$

$$+(|0\rangle_A-|1\rangle_A)({}_A\langle 0|-{}_A\langle 1|)\otimes(|0\rangle_B-|1\rangle_B)({}_B\langle 0|-{}_B\langle 1|)]$$

所以只当$\lambda\neq\frac{1}{2}$值时是不可分离的.

10.25 用 Peres 判据判断一个态是否可分 (2)

题 10.25 确定使下述态成为不可分离态的F数值

$$\rho_1=(1-F)|\psi^-\rangle\langle\psi^-|+F|11\rangle\langle 11|$$

$$\rho_2=F|\psi^-\rangle\langle\psi^-|+\frac{1-F}{3}|\psi^+\rangle\langle\psi^+|+\frac{1-F}{3}|\phi^-\rangle\langle\phi^-|+\frac{1-F}{3}|\phi^+\rangle\langle\phi^+|$$

解 由于

$$\begin{aligned}\rho_1&=(1-F)|\psi^-\rangle\langle\psi^-|+F|11\rangle\langle 11|\\&=(1-F)\frac{1}{2}(|01\rangle-|10\rangle)(\langle 01|-\langle 10|)+F|11\rangle\langle 11|\\&=(1-F)\frac{1}{2}(|01\rangle\langle 01|+|10\rangle\langle 10|-|01\rangle\langle 10|-|10\rangle\langle 01|)+F|11\rangle\langle 11|\end{aligned}$$

对第二位作部分转置，得到

$$\rho_1^{T_2}=(1-F)\frac{1}{2}(|01\rangle\langle 01|+|10\rangle\langle 10|-|00\rangle\langle 11|-|11\rangle\langle 00|)+F|11\rangle\langle 11|$$

写成矩阵形式，有

$$\rho_1^{T_2}=\begin{pmatrix}\frac{1-F}{2}&0&0&0\\0&\frac{1-F}{2}&0&0\\0&0&0&\frac{1-F}{2}\\0&0&\frac{1-F}{2}&F\end{pmatrix}$$

易求出其本征值为$\lambda_{1,2}=\frac{1-F}{2}$，$\lambda_{3,4}=\frac{F\pm\sqrt{F^2+(F-1)^2}}{2}$. 当$F<1$时，由于$\lambda_4=\frac{F-\sqrt{F^2+(F-1)^2}}{2}<0$，故$\rho_1^{T_2}$非正定，即$\rho_1$不可分离. 只当$F=1$时$\rho_1$可分离.

另一ρ_2态的情况

$$\begin{aligned}\rho_2&=F|\psi^-\rangle\langle\psi^-|+\frac{1-F}{3}|\psi^+\rangle\langle\psi^+|+\frac{1-F}{3}|\phi^-\rangle\langle\phi^-|+\frac{1-F}{3}|\phi^+\rangle\langle\phi^+|\\&=\frac{4F-1}{3}|\psi^-\rangle\langle\psi^-|+\frac{1-F}{3}I_{AB}\end{aligned}$$

部分转置后，得

$$\rho_2^{T_2}=\frac{2F+1}{6}(|01\rangle\langle 01|+|10\rangle\langle 10|)+\frac{1-F}{3}(|00\rangle\langle 00|-|11\rangle\langle 11|)-\frac{4F-1}{6}(|00\rangle\langle 11|+|11\rangle\langle 00|)$$

矩阵形式为

$$\rho_2^{T_2}=\begin{pmatrix}\frac{2F+1}{6} & 0 & 0 & 0\\ 0 & \frac{2F+1}{6} & 0 & 0\\ 0 & 0 & \frac{1-F}{3} & \frac{4F-1}{6}\\ 0 & 0 & \frac{4F-1}{6} & \frac{1-F}{3}\end{pmatrix}$$

其本征值为

$$\lambda_{1,2,3}=\frac{2F+1}{6},\qquad \lambda_4=\frac{1}{2}-F$$

因为当$0<F<1$时，$\lambda_{1,2,3}>0$，所以当$F\leqslant\frac{1}{2}$时$\lambda_4\geqslant 0$，此时ρ_2可分离.

10.26　对处于完全非极化态的粒子进行一系列过滤操作结果的概率

题 10.26　给定完全非极化态$\rho=\frac{1}{2}(|0\rangle\langle 0|+|1\rangle\langle 1|)$，按照算子$\sigma_{n_A},\sigma_{n_B}$和$\sigma_{n_C}$执行一系列过滤操作. 计算下列结果的概率：(1) 测量σ_{n_A}并得到+1，接着测σ_{n_B}得到+1，再测σ_{n_C}得到+1. (2) 测量σ_{n_A}并得到+1，接着测σ_{n_B}得到+1 或−1，再测σ_{n_C}得到+1. (3) 测量σ_{n_A}并得到+1，接着测σ_{n_C}得到+1.

解　(1) 初始时$\rho=\frac{1}{2}I$，测量σ_{n_A}并得到+1 的概率为

$$P_1=\mathrm{Tr}\left[\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}_A\cdot\boldsymbol{\sigma})\rho\right]=\frac{1}{2}$$

测量后系统塌缩到$\rho_1=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}_A\cdot\boldsymbol{\sigma})$描述的态，于是再测量$\sigma_{n_B}$得到+1 的概率为

$$P_2=\mathrm{Tr}\left[\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}_A\cdot\boldsymbol{\sigma})\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}_B\cdot\boldsymbol{\sigma})\right]=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}_A\cdot\boldsymbol{n}_B)$$

测量后系统又塌缩到$\rho_2=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}_B\cdot\boldsymbol{\sigma})$，与上面相似的计算可得，在此密度矩阵下，测量$\sigma_{n_C}$得到+1 的概率为

$$P_3=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}_B\cdot\boldsymbol{n}_C)$$

测量σ_{n_A}、σ_{n_B}、σ_{n_C}所得的结果都为+1 的总概率为

$$P_t=\frac{1}{8}(1+\boldsymbol{n}_A\cdot\boldsymbol{n}_B)(1+\boldsymbol{n}_B\cdot\boldsymbol{n}_C)$$

(2) 类似上面的计算有

$$P_t=\frac{1}{8}(1+\boldsymbol{n}_A\cdot\boldsymbol{n}_B)(1+\boldsymbol{n}_B\cdot\boldsymbol{n}_C)+\frac{1}{8}(1-\boldsymbol{n}_A\cdot\boldsymbol{n}_B)(1-\boldsymbol{n}_B\cdot\boldsymbol{n}_C)$$

$$=\frac{1}{4}\left[1+(\boldsymbol{n}_A\cdot\boldsymbol{n}_B)(\boldsymbol{n}_B\cdot\boldsymbol{n}_C)\right]$$

(3)
$$P_t=\frac{1}{4}(1+\boldsymbol{n}_A\cdot\boldsymbol{n}_C)$$

10.27　同一密度矩阵的不同实现

题 10.27　考虑下述粒子数 $N\gg1$ 的五个量子系综。(1) S_1 由在态 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 中随机分布的粒子所组成；(2) S_2 由在态 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle+|1\rangle)$ 和 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle-|1\rangle)$ 中随机分布的粒子所组成；(3) S_3 由在态 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle-i|1\rangle)$ 和 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle+i|1\rangle)$ 中随机分布的粒子所组成；(4) S_4 由在态 $\sin(\theta/2)|0\rangle+\cos(\theta/2)\mathrm{e}^{i\phi}|1\rangle$ 的粒子所组成，这里 θ 和 ϕ 是两个常数分布的随机变数；(5) S_5 由在态 $\sin(\theta/2)|0\rangle+\cos(\theta/2)|1\rangle$ 的粒子所组成，这里 θ 是一个常数分布的随机变数.

试问有可能去设计一些测量来区分粒子是哪组的吗?

解　这五个系综都由同一密度矩阵 $\boldsymbol{\rho}=\frac{1}{2}(|0\rangle\langle0|+|1\rangle\langle1|)$ 描述，故不可区分.

10.28　对给定初态的粒子，求 N 次算符 $\sigma_k\equiv\boldsymbol{n}_k\cdot\sigma$ 过滤测量结果的概率

题 10.28　考虑一个初始处在 $|0\rangle$ 态上的粒子. 我们执行 N 次关于算符 $\sigma_k\equiv\boldsymbol{n}_k\cdot\boldsymbol{\sigma}$ 的过滤测量，这里 $n_k=\left[\sin\left(\frac{k\pi}{2N}\right),\ 0,\ \cos\left(\frac{k\pi}{2N}\right)\right]$ $(k=1,2,\cdots,N)$. 计算全部测量结果都是 +1 的概率. 当 $N\to\infty$ 时出现什么?

解　第一次测量 $\sigma_1\equiv\boldsymbol{n}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}$，结果为+1 的概率为

$$P_1=\mathrm{Tr}\left[\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}_1\cdot\boldsymbol{\sigma})|0\rangle\langle0|\right]=\mathrm{Tr}\left(\frac{1}{2}|0\rangle\langle0|\right)+\frac{1}{2}\mathrm{Tr}\left(\boldsymbol{n}_1\cdot\langle0|\boldsymbol{\sigma}|0\rangle\right)$$

由于

$$\langle0|\sigma_1|0\rangle=\langle0|\sigma_2|0\rangle=0\ \langle0|\sigma_3|0\rangle=-1$$

则有　$P_1=\frac{1}{2}(1-\boldsymbol{n}_{1_3})=\frac{1}{2}\left(1-\cos\frac{\pi}{2N}\right)$(其中 $\boldsymbol{n}_{1_3}$ 为 $\boldsymbol{n}_1$ 的第三分量)，第 k 次之后，第 $k+1$ 次测量的概率为

$$P_{k+1}=\mathrm{Tr}\left[\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}_k\cdot\boldsymbol{\sigma})\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}_{k+1}\cdot\boldsymbol{\sigma})\right]=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}_k\cdot\boldsymbol{n}_{k+1})=\frac{1}{2}\left(1+\cos\frac{\pi}{2N}\right)$$

$$P=\frac{1}{2}\left(1-\cos\frac{\pi}{2N}\right)\frac{1}{2^{N-1}}\left(1+\cos\frac{\pi}{2N}\right)^{N-1}\to0\,(N\to\infty\text{时})$$

若改初态为 $|1\rangle$，则有

$$P=\frac{1}{2^N}\left(1+\cos\frac{\pi}{2N}\right)^N=\frac{1}{2^N}\left[2-\frac{1}{2}\left(\frac{\pi}{2N}\right)^2\right]^N=\left[1-\left(\frac{\pi}{4N}\right)^2\right]^N\to1\,(N\to\infty\text{时})$$

10.29　Ramsey 谱学中频率测量

题 10.29　在 Ramsey 谱学中一个有兴趣的问题是测量如下 Hamilton 量中的频率 $\varDelta$，

$$H=-\frac{\varDelta}{2}\sigma_z$$

为此，制备一个两能级系统在 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle+|1\rangle)$ 态上，并让它按这个 H 演化一个固定的时间 T．在 T 之后测量算符 σ_z，(1) 计算得到 +1 的概率．通过测量这个概率即可算出 $\varDelta$．(2) 如果重复 N 次实验，计算得到 n 次为 +1 的概率．(3) 计算得到 +1 结果的平均次数，以及它的方均差．(4) 证明 $\varDelta$ 的测量误差是 $\delta\varDelta=\frac{1}{T\sqrt{N}}$．

解　(1) 在 $H=-\frac{\varDelta}{2}\sigma_z$ 作用下有

$$|\varPsi(t)\rangle=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}|\varPsi(0)\rangle=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Delta\sigma_z t/2\hbar}|\varPsi(0)\rangle$$

将 $|\varPsi(0)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle+|1\rangle)$ 代入上式，得到

$$|\varPsi(T)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\Delta T}{2\hbar}}|0\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\Delta T}{2\hbar}}|1\rangle$$

这时测 σ_x，结果为 +1 的概率为

$$P=\left|\frac{1}{\sqrt{2}}(\langle 0|+\langle 1|)|\varPsi(T)\rangle\right|^2=\frac{1}{2}\left(\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\Delta T}{2\hbar}}+\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\Delta T}{2\hbar}}\right)^2=\cos^2\left(\frac{\Delta T}{2\hbar}\right)$$

于是

$$\varDelta=\frac{2\hbar}{T}\arccos\sqrt{P}$$

(2) 重复 N 次实验，结果得到 n 次为 +1 的概率服从二项式分布，即

$$P_n=C_N^n p^n(1-p)^{N-n}=C_N^n\cos^{2n}\left(\frac{\Delta T}{2\hbar}\right)\sin^{2(N-n)}\left(\frac{\Delta T}{2\hbar}\right)$$

式中，$C_N^n=\frac{N!}{n!(N-n)!}$，$p$ 为一次测量 σ_x 取+1 的概率．

(3) 设“测量结果为 +1”这一事件，用“1”代表，“测量结果为 −1”的事件用“0”代表．则测量结果为 +1 的平均次数变为求所有数之和的平均值．由概率论可知

$$\bar{n}=Np+N\times 0\times(1-p)=Np=N\cos^2\left(\frac{\Delta T}{2\hbar}\right)$$

同样由概率论可知均方差为

$$\Delta n=\sqrt{\overline{n^2}-\bar{n}^2}=\sqrt{nP(1-P)}=\sqrt{N}\cos\frac{\Delta T}{2\hbar}\sin\frac{\Delta T}{2\hbar}$$

(4) 令 $\delta\bar{n}=\Delta n$，则有

$$2N\cos\frac{\Delta T}{2\hbar}\sin\frac{\Delta T}{2\hbar}\frac{T}{2\hbar}\delta\varDelta=\sqrt{N}\cos\frac{\Delta T}{2\hbar}\sin\frac{\Delta T}{2\hbar}$$

化简后得

$$\delta\varDelta=\frac{1}{T\sqrt{N}}$$

10.30　对于存在退相干的情况，考虑上题的问题

题 10.30　对于存在退相干的情况，考虑上面问题. 假设在T期间退相干将密度算符的非对角项$|0\rangle\langle 1|$和$|1\rangle\langle 0|$衰减一个因子$e^{-\gamma T}$. 计算Δ测量中的误差.

解　用密度矩阵表示同时有退相干情况下系统量子态

$$\rho(T)=\frac{1}{2}\left(|0\rangle\langle 0|+|1\rangle\langle 1|+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\Delta T}{\hbar}}\mathrm{e}^{-\gamma T}|0\rangle\langle 1|+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\Delta T}{\hbar}}\mathrm{e}^{-\gamma T}|1\rangle\langle 0|\right)$$

$$P=\frac{1}{\sqrt{2}}\big(\langle 0|+\langle 1|\big)\rho(T)\frac{1}{\sqrt{2}}\big(|0\rangle+|1\rangle\big)=\frac{1}{2}\left[1+\mathrm{e}^{-\gamma T}\cos\left(\frac{\Delta T}{\hbar}\right)\right]$$

由二项式分布，可得

$$P_n=C_N^n\left\{\frac{1}{2}\left[1+\mathrm{e}^{-\gamma T}\cos\left(\frac{\Delta T}{\hbar}\right)\right]\right\}^n\left\{\frac{1}{2}\left[1-\mathrm{e}^{-\gamma T}\cos\left(\frac{\Delta T}{\hbar}\right)\right]\right\}^{N-n}$$

且有

$$\overline{n}=\frac{N}{2}\left[1+\mathrm{e}^{-\gamma T}\cos\left(\frac{\Delta T}{\hbar}\right)\right],\qquad \Delta n=\sqrt{Np(1-p)}=\sqrt{\frac{N}{4}\left[1-\mathrm{e}^{-2\gamma T}\cos^2\left(\frac{\Delta T}{\hbar}\right)\right]}$$

由$\delta\overline{n}=\Delta n$，可得

$$\frac{N}{2}\mathrm{e}^{-\gamma T}\sin\left(\frac{\Delta T}{\hbar}\right)\frac{T}{\hbar}\delta\Delta=\sqrt{\frac{N}{4}\left[1-\mathrm{e}^{-2\gamma T}\cos^2\left(\frac{\Delta T}{\hbar}\right)\right]}$$

即有

$$\delta\Delta=\frac{\sqrt{1-\mathrm{e}^{-2\gamma T}\cos^2\left(\frac{\Delta T}{\hbar}\right)}}{\sqrt{N}\mathrm{e}^{-\gamma T}\sin\left(\frac{\Delta T}{\hbar}\right)\frac{T}{\hbar}}$$

10.31　对n个两能级系统的高纠缠态，考虑 Ramsey 谱学测量

题 10.31　考虑n个两能级系统，它们每一个都由 Hamiltonian $H=-\frac{\varDelta}{2}\sigma_z$所描述并执行如下 Ramsey 类型的实验$N$次制备高纠缠态

$$\left|\psi^+\right\rangle=\frac{1}{2}\big(|00\cdots 00\rangle+|11\cdots 11\rangle\big)$$

让它演化T时间，接着执行态$\left|\psi^{\pm}\right\rangle$的测量

$$\left|\psi^{\pm}\right\rangle=\frac{1}{2}\big(|00\cdots 00\rangle\pm|11\cdots 11\rangle\big)$$

如果执行N次这样的测量，计算$\varDelta$的测量误差. 将这里的结果和上面 Ramsey 谱学的标准测量办法相比较.

解　初态$|\psi\rangle$经过时间T演化后的态为

$$|\psi(T)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\left(\sum_{i=1}^{n}\frac{\Delta\sigma_{zi}}{2}\right)T}|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{\frac{-i\Delta Tn}{2\hbar}}|00\cdots0\rangle + e^{\frac{i\Delta Tn}{2\hbar}}|11\cdots1\rangle\right)$$

执行$|\psi^+\rangle$测量，概率为$P_+ = \left|\langle\psi^+|\psi(T)\rangle\right|^2 = \cos^2\dfrac{\Delta Tn}{2\hbar}$

执行$|\psi^-\rangle$测量，概率为$P_- = \left|\langle\psi^-|\psi(T)\rangle\right|^2 = \sin^2\dfrac{\Delta Tn}{2\hbar}$

作N次重复的实验，测得结果为$|\psi^+\rangle$的平均次数为

$$\overline{n} = N\cos^2\frac{\Delta Tn}{2\hbar}$$

均方根为$\Delta n = \sqrt{N\cos^2\dfrac{\Delta Tn}{2\hbar}\sin^2\dfrac{\Delta Tn}{2\hbar}}$

令$\delta\overline{n} = \Delta n$，则有

$$2N\cos\left(\frac{\Delta Tn}{2\hbar}\right)\sin\left(\frac{\Delta Tn}{2\hbar}\right)\frac{Tn}{2\hbar}\delta\Delta = \sqrt{N}\cos\left(\frac{\Delta Tn}{2\hbar}\right)\sin\left(\frac{\Delta Tn}{2\hbar}\right)$$

亦即有$\delta n = \dfrac{\hbar}{\sqrt{NTn}}$，当$n$越大时，测量误差越小.

10.32　Kraus 定理

题 10.32　证明 Kraus 定理.

解　对于H_A中任一态$|\psi\rangle_A = \sum_i \alpha_i|i\rangle_A$、$H_B$中对应的态$|\varphi^*\rangle_B = \sum_i \alpha_i^*|i'\rangle_B$、以及$|\Phi\rangle = \sum_{i=1}^{N}|i\rangle_A|i'\rangle_B$，有

$$|\psi\rangle_A = {}_B\langle\varphi^*|\Phi\rangle$$

设M_A是H_A中的一个算符，则

$$M_A\otimes I_B|\Phi\rangle = \sum_{i=1}^{N}M_A|i\rangle_A|i'\rangle_B$$

进而${}_B\langle\varphi^*|$左乘等式两边，可得

$${}_B\langle\varphi^*|M_A\otimes I_B|\Phi\rangle = M_A|\psi\rangle_A = M_A\,{}_B\langle\varphi^*|\Phi\rangle \tag{1}$$

由式(1)可知，先用$M_A\otimes I_B$对$|\Phi\rangle$作用. 再同${}_B\langle\varphi^*|$取内积，等价于先与${}_B\langle\varphi^*|$求内积，再用M_A作用.

下面证明 Kraus 定理. 因为$\$$是完全正的，所以对于任一$|\Psi\rangle\in H_A\otimes H_B$，$\$_A\otimes I_B(|\Psi\rangle\langle\Psi|)$可视为$H_A\otimes H_B$中的某一密度算符$\rho'_{AB}$，将它用$H_A\otimes H_B$中的完备基矢$\{|\Phi_\mu\rangle\}$展开有

$$\rho'_{AB} = \$_A\otimes I_B(|\Psi\rangle\langle\Psi|) = \sum_\mu q_\mu|\Phi_\mu\rangle\langle\Phi_\mu|$$

这里的$\langle\Phi_\mu|\Phi_\mu\rangle=N$，$\sum_\mu q_\mu=1$，$q_\mu\geqslant 0$. 由于

$$\$_A\left(|\psi\rangle_{AA}\langle\psi|\right)=\$_A\left({}_B\langle\varphi^*|\Phi\rangle\langle\Phi|\varphi^*\rangle_B\right)$$

由上式可见，上式右边$|\Phi\rangle$先与${}_B\langle\varphi^*|$求内积，再受$\$_A$作用与先用$\$_A\otimes I_B$作用再与${}_B\langle\varphi^*|$内积等价，故有

$$\begin{aligned}\$_A\left(|\psi\rangle_{AA}\langle\psi|\right)&={}_B\langle\varphi^*|\left[\$_A\otimes I_B\left(|\Psi\rangle_{AB\,AB}\langle\Psi|\right)\right]|\varphi^*\rangle_B\\&={}_B\langle\varphi^*|\sum_\mu q_\mu|\Phi_\mu\rangle\langle\Phi_\mu|\varphi^*\rangle_B\\&\equiv\sum_\mu M_\mu|\psi\rangle_{AA}\langle\psi|M_\mu^\dagger\end{aligned}$$

上式即为超算符的求和表示，Kraus 定理得证，其中$M_\mu|\psi\rangle_A$定义为

$$\sqrt{q_\mu}\;{}_B\langle\varphi^*|\Phi_\mu\rangle$$

10.33 保迹超算符可逆的充要条件

题 10.33　设$\$_1$是一个保迹超算符，若存在另一个超算符$\$_2$使得$\$_2\circ\$_1=I$，则称$\$_1$是可逆的，$\$_2$称为$\$_1$的逆. 证明：保迹超算符可逆的充分必要条件是它是幺正的.

证明　假设对于保迹超算符$\$_1$，存在逆$\$_2$. 根据 Kraus 定理，$\$_1$和$\$_2$有算符和表示

$$\$_1(\rho)=\sum_m M_m\rho M_m^\dagger,\qquad \$_2(\rho)=\sum_n N_n\rho N_n^\dagger$$

由于

$$\sum_{mn}N_nM_m\rho(N_nM_m)^\dagger=\sum_n N_n\$_I(\rho)N_n^\dagger=\$_2\circ\$_1(\rho)$$

$$\sum_{mn}M_m^\dagger\;N_n^\dagger N_nM_m=I$$

因此N_nM_m是$\$_2\circ\$_1$的 Kraus 算符. 然而，$\$_2\circ\$_1=I$，因此$N_nM_m$也是恒等映射$I$的 Kraus 算符，该映射有平庸表示

$$I(\rho)=I\rho I^\dagger$$

因此，根据算符和的多表示定理有

$$N_nM_m=\lambda_{\{n,m\}}I$$

式中，$\lambda_{\{n,m\}}$满足$\sum_{mn}\left|\lambda_{\{n,m\}}\right|^2=1$. 根据$\sum_n N_n^\dagger N_n=I$，我们有

$$M_m^\dagger M_j=\sum_n M_m^\dagger\;N_n^\dagger N_nM_j=\sum_n\lambda_{\{n,m\}}^*\lambda_{\{n,j\}}I\equiv\gamma_{\{m,j\}}I$$

由于我们考虑的是非零算符，因此$\gamma_{\{m,m\}}\neq 0$. 于是M_m是可逆算符，而且有

$$M_m^\dagger=\gamma_{\{m,m\}}M_m^{-1}$$

于是

$$M_m M_m^\dagger M_j = \gamma_{\{m,m\}} M_j = \gamma_{\{m,j\}} M_m$$

因此任一 M_m 都正比于另一 M_j，于是，超算符的算符和表示只有一项，考虑到归一化，我们得到

$$\$_1(\rho) = U\rho U^\dagger$$

式中，U 为幺正算符.

10.34　用超算符实现量子态的超空间传送

题 10.34　任何量子过程都可以用超算符来实现，量子态超空间传送也不例外. 试用超算符实现量子态的超空间传送. 即找出描述量子态超空间传送

$$\$\left(|\psi\rangle_{23\,23}\langle\psi| \otimes |\phi\rangle_{11}\langle\phi|\right) = |\phi\rangle_{33}\langle\phi| \otimes \frac{I_{12}}{4}$$

的超算符 \$ 的和表示. 这里 $|\psi\rangle_{23}$ 是某个最大纠缠态，$|\phi\rangle_1$ 是任一给定态. 也即找出 Kraus 算符序列 $\{L_\mu\}$，使得有

$$\begin{cases} \sum\limits_\mu L_\mu \left(|\psi\rangle_{23\,23}\langle\psi| \otimes |\phi\rangle_{11}\langle\phi|\right) L_\mu^\dagger = |\phi\rangle_{33}\langle\phi| \otimes \dfrac{I_{12}}{4} \\ \sum\limits_\mu L_\mu L_\mu^\dagger = 1 \end{cases}$$

解　设

$$|\phi\rangle_1 = \alpha|0\rangle_1 + \beta|1\rangle_1$$

不失一般性，假设 2、3 粒子处于纠缠态

$$|\psi^-\rangle_{23} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle_2|1\rangle_3 - |1\rangle_2|0\rangle_3\right)$$

则 $|\phi\rangle_1|\psi^-\rangle_{23}$ 按照 $|\Phi_\mu\rangle_{12}$ 展开有

$$|\phi\rangle_1|\psi^-\rangle_{23} = \sum_\mu |\Phi_\mu\rangle_{12} u_\mu |\phi\rangle_3$$

式中

$$u_0 = -1, \quad u_1 = \sigma_1, \quad u_2 = \mathrm{i}\sigma_2, \quad u_3 = \sigma_3$$

以及

$$\begin{cases} |\Phi_0\rangle_{12} = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle_1|1\rangle_2 - |1\rangle_1|0\rangle_2\right) \\ |\Phi_1\rangle_{12} = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle_1|0\rangle_2 - |1\rangle_1|1\rangle_2\right) \\ |\Phi_2\rangle_{12} = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle_1|0\rangle_2 + |1\rangle_1|1\rangle_2\right) \\ |\Phi_3\rangle_{12} = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle_1|1\rangle_2 + |1\rangle_1|0\rangle_2\right) \end{cases}$$

定义 $L_\mu = u_\mu^\dagger \otimes |\Phi_\mu\rangle_{12\,12}\langle\Phi_\mu|$，则有

$$\sum_\mu L_\mu\left(|\psi\rangle_{23\,23}\langle\psi|\otimes|\phi\rangle_{11}\langle\phi|\right)L_\mu^\dagger = |\phi\rangle_{33}\langle\phi|\otimes\frac{I_{12}}{4}$$

(若 $|\psi\rangle_{23}$ 为其他最大纠缠态，则相应的 u_μ 将有所变化).

10.35 将给定的主方程等效地表示为 Kraus 求和形式

题 10.35 为了再次具体地说明主方程方法和 Kraus 求和框架之间的关联，将下面两种主方程

$$\frac{\mathrm{d}\rho_I}{\mathrm{d}t} = \Gamma\left(a\rho_I a^\dagger - \frac{1}{2}a^\dagger a\rho_I - \frac{1}{2}\rho_I a^\dagger a\right)$$

$$\frac{\mathrm{d}\rho_I}{\mathrm{d}t} = \Gamma\left[a^\dagger a\rho_I a^\dagger a - \frac{1}{2}\left(a^\dagger a\right)^2\rho_I - \frac{1}{2}\rho_I\left(a^\dagger a\right)^2\right]$$

等效表示为 Kraus 求和的形式. 即给出它们 Kraus 算符 $\{M_0, M_1\}$ 的 2×2 矩阵表示.

解 设振子原子的状态空间由基态($n=0$)和第一激发态($n=1$)组成.

(1) 第一个主方程描述的是一个衰减振子，它的基态不改变，激发态在热库影响下逐渐退化为基态. 这相当于一个量子衰减退相干通道. 假设演化过程持续时间 Δt，则激发态将以 $1-\mathrm{e}^{-\Gamma\Delta t}$ 的概率衰减至基态. 于是 Kraus 求和表示的两个超算符可以表示为

$$M_0 = \begin{pmatrix} 1, & 0 \\ 0, & \mathrm{e}^{-\frac{\Gamma\Delta t}{2}} \end{pmatrix}, \qquad M_1 = \begin{pmatrix} 0, & \sqrt{1-\mathrm{e}^{-\Gamma\Delta t}} \\ 0, & 0 \end{pmatrix}$$

(2) 第二个主方程描述的是振子的位相衰减，这相当于量子位相衰减退相干通道. 经过时间 Δt 后，密度矩阵非对角项按下式衰减

$$\rho_{nm}(t) = \rho_{nm}(0)\exp\left[-\frac{1}{2}(n-m)^2\Gamma\Delta t\right] = \rho_{nm}(0)\exp\left(-\frac{1}{2}\Gamma\Delta t\right), \qquad n,m=0,1$$

于是，此时 Kraus 求和表示的三个超算符可以表示为

$$M_0 = \mathrm{e}^{-\frac{1}{4}\Gamma\Delta t}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad M_1 = \sqrt{1-\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\Gamma\Delta t}}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad M_2 = \sqrt{1-\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\Gamma\Delta t}}\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

10.36 寻找一个实现量子纠缠交换(swapping)操作的 Hamilton 量

题 10.36 寻找一个实现量子纠缠交换(swapping)操作的 Hamilton 量.

解 参照 10.44 解答中的交换算符，并利用 $U = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}H\Delta t}$，可形式上反解得出我们所需要的 Hamilton 量.

10.37 连续变量 teleportation

题 10.37 考虑连续变量 teleportation 情况：在 Alice 和 Bob 之间已建有一条连续变量

纠缠态的量子通道（他俩分别掌握粒子 A 和 B）

$$|Q,P\rangle_{AB}=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int \mathrm{d}q\mathrm{e}^{\mathrm{i}Pq}|q\rangle_A\otimes|q+Q\rangle_B$$

这里 $Q=q_A-q_B, P=p_A+p_B$ 分别是两个粒子相对位置和总动量算符(它俩对易，有共同本征态)的本征值. 现 Alice 有波包 $|\psi\rangle_C=\int \mathrm{d}q|q\rangle_C\langle q|\psi\rangle_C$ 需要传给 Bob. 为达此目的，他俩如何制定与所送波包无关的操作?

解　容易检验，现作为量子通道的连续纠缠态是正交归一的

$$_{AB}\langle Q',P'|Q,P\rangle_{AB}=\delta(Q'-Q)\delta(P'-P)$$

可构成一组纠缠的连续正交归一基. 接着去求出

$$\begin{aligned}
_{AB}\langle Q,P|q_1,q_2\rangle_{AB}&=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int \mathrm{d}q\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Pq}\ _A\langle q|q_1\rangle_A\ _B\langle q+Q|q_2\rangle_B\\
&=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int \mathrm{d}q\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Pq}\delta(q-q_1)\delta(q+Q-q_2)\\
&=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Pq_1}\delta(Q-(q_2-q_1))
\end{aligned}$$

于是将此三粒子系统(C 为已分离的形式)写为 AC 粒子纠缠态的形式

$$\begin{aligned}
|Q,P\rangle_{AB}|\psi\rangle_C&=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int \mathrm{d}q\mathrm{e}^{\mathrm{i}Pq}|q\rangle_A|q+Q\rangle_B\int \mathrm{d}q'\ _C\langle q'|\psi\rangle_C|q'\rangle_C\\
&=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int \mathrm{d}q\mathrm{d}q'\mathrm{d}Q'\mathrm{d}P'\mathrm{e}^{\mathrm{i}Pq}\ _C\langle q'|\psi\rangle_C|Q',P'\rangle_{AC\,AC}\langle Q',P'|q,q'\rangle_{AC}|q+Q\rangle_B\\
&=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int \mathrm{d}q\mathrm{d}q'\mathrm{d}Q'\mathrm{d}P'\mathrm{e}^{\mathrm{i}Pq}\ _C\langle q'|\psi\rangle_C|Q',P'\rangle_{AC\,AC}\langle Q',P'|q,q'\rangle_{AC}|q+Q\rangle_B\\
&=\frac{1}{2\pi}\int \mathrm{d}q\mathrm{d}q'\mathrm{d}Q'\mathrm{d}P'\mathrm{e}^{\mathrm{i}Pq}\ _C\langle q'|\psi\rangle_C\mathrm{e}^{-\mathrm{i}P'q'}\delta(Q'-(q-q'))|Q',P'\rangle_{AC}|q+Q\rangle_B\\
&=\frac{1}{2\pi}\int \mathrm{d}q'\mathrm{d}Q'\mathrm{d}P'\mathrm{e}^{\mathrm{i}P(Q'+q')-\mathrm{i}P'q'}\ _C\langle q'|\psi\rangle_C|Q',P'\rangle_{AC}|q'+Q'+Q\rangle_B
\end{aligned}$$

于是若 Alice 在纠缠基 AC 中测得某个态 $|Q',P'\rangle_{AC}$，则导致 Bob 手中的 B 粒子处于

$$\int \mathrm{d}q'\mathrm{e}^{\mathrm{i}PQ'+\mathrm{i}(P-P')q'}\ _C\langle q'|\psi\rangle_C|q'+Q'+Q\rangle_B$$

态上. 这时 Alice 将自己的测量结果 (Q',P') 告诉 Bob，Bob 就可以利用位移变换和动量变换

$$\begin{cases}D(q)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{p}q}=\int \mathrm{d}q'|q'+q\rangle\langle q'|\\ D(p)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p\hat{q}}=\int \mathrm{d}q'\mathrm{e}^{-\mathrm{i}pq'}|q'\rangle\langle q'|\end{cases}$$

将自己的 B 粒子转化为 Alice 想要发送给他的态. 因为，注意到

$$D(p)D(q)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}pq}D(q)D(p)$$

于是 Bob 可以采用下面算符来得到这个态

$$\begin{aligned}
U&=D(-P')D(-Q')D(P)D(-Q)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}PQ'}D(-P')D(P)D(-Q')D(-Q)\\
&=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}PQ'}D(P-P')D(-Q'-Q)
\end{aligned}$$

这时

$$
\begin{aligned}
U|\mathrm{Bob}\rangle_B &= \int \mathrm{d}q'\langle q'|\psi\rangle \exp\left[PQ'+(P-P')q'\right]\exp(-\mathrm{i}PQ') \\
&\quad \cdot D(P-P')D(-Q'-Q)|q'+Q'+Q\rangle_B \\
&= \int \mathrm{d}q'\langle q'|\psi\rangle \mathrm{e}^{\mathrm{i}(P-P')q'} D(P-P')|q'\rangle_B \\
&= \int \mathrm{d}q'\langle q'|\psi\rangle \mathrm{e}^{\mathrm{i}(P-P')q'}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(P-P')q'}|q'\rangle_B \\
&= \int \mathrm{d}q'\langle q'|\psi\rangle|q'\rangle_B \\
&= \left(\int \mathrm{d}q'|q'\rangle_{B\,B}\langle q'|\right)|\psi\rangle_B = |\psi\rangle_B
\end{aligned}
$$

总之，Alice 和 Bob 之间的传输协议是：

(1) 制备纠缠态 $|Q,P\rangle_{AB}$；

(2) Alice 在 AC 纠缠的基下测量 (Q',P')；

(3) Alice 将其测量结果 (Q',P') 告诉给 Bob;

(4) Bob 根据数据 (Q',P') 制定算符 $D(-P')D(-Q')D(P)D(-Q)$，并将之作用于粒子 B 状态上. 最后即得所传送的态.

10.38 任意 d 维幺正阵不能被分解为少于 d–1 个二维幺正阵乘积

题 10.38 证明：存在一个 $d\times d$ 的幺正矩阵 U，它不能被分解为少于 $d-1$ 个二维幺正矩阵的乘积.

证明 由于 d 维幺正矩阵 U 的独立变数最多为

$$2d^2-d-d(d-1)=d^2$$

而作为乘积因子的每一个二维幺正矩阵最多含独立变数 4 个. 为了用少于 $d-1$ 个(比如用 $d-2$ 个)二维幺正矩阵乘积来分解 U，则它们总共所含独立变数的个数不应少于 U 中所含的独立变数个数，也即应有

$$d^2 \leqslant 4(d-2)$$

可是，这个式子对所有 d 值都是不成立的. 所以对于独立变数稍多一些的 U 矩阵，不能用少于 $d-1$ 个二维幺正矩阵乘积来分解.

当然，这里的 $d-1$ 是下限，并非主张一定可以用 $d-1$ 个来分解. 如果能够分解为 $d-1$ 个，那必只是 $d=2$ 这一种情况.

10.39 EPR 佯谬的物理思想

题 10.39 解说 EPR 佯谬的物理思想.

答 1935 年 Einstein, Podolsky and Rosen 提出关于局域性(locality)、实在性(reality)和完备性(completeness)的涵义，并论证了量子力学中关于量子态的描述不是关于物理实在的完备描述。EPR 佯谬的主要前提是：(1) 完全相关性. 对于两粒子 AB 的单态 $|\psi^-\rangle$，沿同一

方向分别对粒子 A 和粒子 B 测量自旋时，测量结果必定相反. (2) 局域性. 由于当对两个系统 AB 进行测量时，二者并无相互作用，因此对一者的测量操作不会对另一者产生任何影响. (3)实在性. 如果在不以任何方式干扰一个系统的情况下，我们能够确定地(100%)预言该系统某个物理量的值，则存在一个相应于该物理量的物理实在元素(element of physical reality). (4) 完备性. 在一个物理理论中，任何一个物理实在元素必须有其对应物.

EPR 佯谬如下展开. 假设处于单态 $\left|\psi^-\right\rangle$ 的粒子 AB 处于类空间隔. 由于完全相关性(1)，确定地预言粒子 B 在某个方向上的自旋值可以通过通过选择在同一方向测量粒子 A 的自旋来实现. 再根据局域性(2)，对粒子 A 所进行的测量不会对粒子 B 产生任何影响，然后根据实在性(3)，粒子 B 的该方向的自旋是一个物理实在元素，因此粒子 B 的所有自旋分量都是物理实在元素(对于粒子 A 可以进行平行的讨论) . 然而，没有一个自旋 1/2 的粒子的量子态，其所有方向的自旋分量都具有确定的值. 因此，根据完备性(4)，量子力学关于波函数的描述不是一个完备的理论.

Bell 定理证明了 EPR 的局域实在性与两粒子量子系统的某些预言是矛盾的.

10.40　EPR 态是对 Bell 不等式造成最大破坏的态

题 10.40　证明 EPR 态是对 Bell 不等式造成最大破坏的态.

证明　以 CHSH 不等式为例，该不等式为 $\left|B_{\mathrm{CHSH}}\right| \leqslant 2$，其中

$$\left\langle B_{\mathrm{CHSH}}\right\rangle \equiv E(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})+E(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}')+E(\boldsymbol{a}',\boldsymbol{b})-E(\boldsymbol{a}',\boldsymbol{b}')$$

为关联函数. 对于两粒子纯态 $|\Psi\rangle$，$E(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})$ 的量子力学表达式为

$$E(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})=\langle\Psi|(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a})\otimes(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{b})|\Psi\rangle$$

对于单态 $\left|\psi^-\right\rangle$，选择 $\boldsymbol{a}',\boldsymbol{b},\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}'$ 在一个平面上顺次相隔 45° . 在这种情形下可以计算得 $\left|\left\langle B_{\mathrm{CHSH}}\right\rangle\right| = 2\sqrt{2} > 2$，于是破坏 CHSH 不等式.

下面证明这是最大破坏. 考虑 4 个算符 A, A', B, B'，它们满足 $A^2 = A'^2 = B^2 = B'^2 = I$. 定义

$$B_{\mathrm{CHSH}} \equiv A\otimes B + A'\otimes B + A\otimes B' - A'\otimes B'$$

为 CHSH 算符，则易得

$$B_{\mathrm{CHSH}}^2 \equiv 4I\otimes I - [A, A']\otimes[B, B']$$

算符 A 的矩阵范数定义为

$$\|A\| \equiv \max_{\||\psi\rangle\|=1}\|A|\psi\rangle\|$$

根据范数的性质，易见

$$\|[A, A']\| \leqslant \|AA' - A'A\| \leqslant 2\|A\|\|A'\| \leqslant 2, \qquad \|[B, B']\| \leqslant 2$$

即得

$$\left\|B_{\mathrm{CHSH}}^2\right\| \leqslant 8 \quad \text{或} \quad \left\|B_{\mathrm{CHSH}}\right\| \leqslant 2\sqrt{2}$$

于是，单态对 CHSH 不等式的破坏是最大的.

10.41 迄今，在 Bell 不等式问题上什么是实验支持的？什么是还没清楚的？

题 10.41 到目前为止，在 Bell 不等式问题上什么是实验支持了的？什么是还没能搞清楚的？

答 至今的几乎所有实验都验证了量子力学系统对 Bell 不等式的破坏. 但至今的所有实验都没有同时弥补两个漏洞，即探测性漏洞和局域性漏洞.

10.42 Hardy 定理

题 10.42 详细推导 Hardy 定理的全部计算.

解 考虑一个两自旋 1/2 系统，在粒子 1 的正交归一基 $\{|u\rangle_1, |v\rangle_1\}$ 下写出任一纠缠态 $|\Psi\rangle \in H_{AB}$

$$|\Psi\rangle = |u\rangle_1 |\phi_u\rangle_2 + |v\rangle_1 |\phi_v\rangle_2$$

其中 $|\phi_u\rangle_2 \neq 0$，$|\phi_v\rangle_2$ 与 $|\phi_u\rangle_2$ 既不正交也不平行，即

$$|\phi_v\rangle_2 = \alpha|\phi_u\rangle_2 + |\phi_u^\perp\rangle_2, \quad \alpha \neq 0$$

式中 $|\phi_u^\perp\rangle_2 \neq 0$, $\langle\phi_u|\phi_u^\perp\rangle = 0$. 因此，可以选择合适的基 $|u\rangle_i$，$|v\rangle_i$，$i = 1,2$ 将 $|\Psi\rangle$ 写为如下形式

$$|\Psi\rangle = a|v\rangle_1|v\rangle_2 + b|u\rangle_1|v\rangle_2 + c|v\rangle_1|u\rangle_2, \qquad abc \neq 0$$

定义可观测量

$$U_i \equiv |u\rangle_{ii}\langle u|, \qquad W_i \equiv |\beta\rangle_{ii}\langle\beta|, \qquad i = 1,2$$

式中

$$|\beta\rangle_1 = \frac{a|v\rangle_1 + b|u\rangle_1}{\sqrt{|a|^2 + |b|^2}}, \qquad |\beta\rangle_2 = \frac{a|v\rangle_2 + c|u\rangle_2}{\sqrt{|a|^2 + |c|^2}}$$

可以很容易验证下列测量结果：(1) $U_1U_2 = 0$. (2) $U_1 = 0 \Rightarrow W_2 = 1$. (3) $U_2 = 0 \Rightarrow W_1 = 1$. (4) 有一定的概率会测得 $W_1 = W_2 = 0$.

接下来的论证为：考虑在某次实验中测得 $W_1 = W_2 = 0$，从 $W_2 = 0$ 和性质(2)可以推出测量 U_1 会得到结果 $U_1 = 1$.类似地可知若测量 U_2 会得到结果 $U_2 = 1$. 根据局域实在论，$U_1 = 1$和$U_2 = 1$是由局域隐变量决定的. 这样，如果在这次实验中本来并不是测量 W_1和W_2，而是测量 U_1和U_2，则会得到结果 $U_1U_2 = 1$，但这与性质(1)矛盾. 因此，我们看到关于局域实在论的假设与量子力学的预言是矛盾的.

10.43 关于条件概率的 Bayes 定理

题 10.43 证明关于条件概率的 Bayes 定理

$$p(A|B)\,p(B) = p(B|A)\,p(A)$$

此公式两边等于积概率 $p(x, y)$.

定理证明很容易，只要将概率和条件概率都还原为相应的频度比值即知. 当 $\{A_i\}$ 是一

个互斥事件的完备集，就是说，$p\left(\sum_i A_i\right)=\sum_i A_i=1$时，有全概率公式

$$p(B)=\sum_i p(B|A_i)\,p(A_i)$$

10.44　求给定系综的 Shannon 熵 $H(X_{均匀})$

题 10.44　求证，当系综$\{x_i, p(x_i)\}$中，先验分布是均匀分布$p(x_i)=\frac{1}{k}$，即对均匀系综$X_{均匀}$，此系综 Shannon 熵$H(X_{均匀})$达到最大值$\log k$.

证明　因为$\lg p(x)$上凸，这使得$-\log p(x)$下凹，所以有

$$-\lg\left(\sum_x p(x)p(x)\right)\leqslant -\sum_x p(x)\lg p(x)=H(X)$$

进一步，用 Lagrange 乘子法来确定$H(X)$极值. 为简化，记$p(x_i)=p_i$. 于是有

$$-\sum_{i=1}^{k} p_i \lg p_i-\lambda\left(\sum_{j=1}^{k} p_j-1\right)=\mathrm{Max}$$

对此式求偏导数$\frac{\partial}{\partial\lambda},\frac{\partial}{\partial p_j}$，并令它们为 0，得

$$\begin{cases}\sum_{j=1}^{k} p_j=1\\ -\lg p_j-p_j\frac{1}{p_j}-\lambda=0, \quad j=1,2,\cdots,k\end{cases}$$

由第二式解出$p_j=2^{-(1+\lambda)}$，两边对j求和，利用归一化第一式，得

$$\lambda=\lg k-1$$

由此得$p_j=1/k$，$j=1,2,\cdots,k$．代入熵函数$H(X_{均匀})=\mathrm{Max}=\log k$．证毕.

10.45　含时 Schrödinger 方程演化下 von Neumann 熵是守恒量

题 10.45　求证：不论初始为纯态或混态，经过含时 Schrödinger 方程的演化，其 von Neumann 熵是守恒量.

证明　对$S(\rho)=-\mathrm{Tr}[\rho(t)\ln\rho(t)]$求导，并利用 Liouville 方程，得

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t}&=-\mathrm{Tr}\left[\frac{\partial\rho(t)}{\partial t}\ln\rho(t)\right]-\mathrm{Tr}\left[\rho(t)\frac{\partial\ln\rho(t)}{\partial t}\right]\\&=-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\mathrm{Tr}\left\{\left[H(t),\rho(t)\right]\ln\rho(t)\right\}-\mathrm{Tr}\left[\rho(t)\frac{\partial\ln\rho(t)}{\partial t}\right]\\&=-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}Tr\left\{\left[\ln\rho(t),H(t)\right]\rho(t)\right\}-\mathrm{Tr}\left[\rho(t)\frac{\partial\ln\rho(t)}{\partial t}\right]\end{aligned}$$

$$=-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}Tr\left[-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\ln\rho(t)}{\partial t}\rho(t)\right]-\mathrm{Tr}\left[\rho(t)\frac{\partial\ln\rho(t)}{\partial t}\right]=0$$

这里第三步等号用了求迹号下算符可以轮转的操作. 于是，即便对含时的开放系统，von Neumann 熵也是运动常数. 就是说，原来纯态还保持为纯态，原来混态仍保持为同样熵的混态. 但是，对于有开放操作的那一类开放系统，这将不成立.

10.46　求 SU(2)型一般混态 von Neumann 熵的普遍表达式

题 10.46　求出 SU(2) 型一般混态的 von Neumann 熵普遍表达式.

答　SU(2) 一般混态有如下矩阵形式

$$\boldsymbol{\rho}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1-\alpha & \beta+\mathrm{i}\gamma\\ \beta-\mathrm{i}\gamma & 1+\alpha\end{pmatrix}$$

这里 α, β, γ 均为实数. 很容易求出此矩阵的本征值为

$$\lambda_+=\frac{1}{2}\left(1+\sqrt{\alpha^2+\beta^2+\gamma^2}\right)\equiv\frac{1}{2}(1+\delta);\qquad \lambda_-=\frac{1}{2}\left(1-\sqrt{\alpha^2+\beta^2+\gamma^2}\right)\equiv\frac{1}{2}(1-\delta)$$

因此 SU(2) 一般混态的 von Neumann 熵为

$$S(\boldsymbol{\rho})=-\mathrm{Tr}(\boldsymbol{\rho}\ln\boldsymbol{\rho})=-(\lambda_+\ln\lambda_++\lambda_-\ln\lambda_-)=\frac{1}{2}\ln\frac{4(1-\delta)^{\delta-1}}{(1+\delta)^{\delta+1}}$$

10.47　$\mathrm{Tr}(\rho_1\lg\rho_1+\rho_2\lg\rho_2)\geqslant\mathrm{Tr}(\rho_1\lg\rho_2+\rho_1\lg\rho_2)$

题 10.47　证明不等式

$$\mathrm{Tr}(\rho_1\lg\rho_1+\rho_2\lg\rho_2)\geqslant\mathrm{Tr}(\rho_1\lg\rho_2+\rho_1\lg\rho_2)$$

证明　设 $\rho_1=\sum_\alpha a_\alpha|\alpha\rangle\langle\alpha|$，$\rho_2=\sum_\beta b_\beta|\beta\rangle\langle\beta|$，于是

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}(\rho_2\lg\rho_1)&=\mathrm{Tr}\left[\left(\sum_\beta b_\beta|\beta\rangle\langle\beta|\right)\lg\left(\sum_\alpha a_\alpha|\alpha\rangle\langle\alpha|\right)\right]\\&=\mathrm{Tr}\left[\left(\sum_\beta b_\beta|\beta\rangle\langle\beta|\right)\left(\sum_\alpha(\lg a_\alpha)|\alpha\rangle\langle\alpha|\right)\right]\\&=\sum_{\alpha,\beta}b_\beta\lg a_\alpha\left|\langle\alpha|\beta\rangle\right|^2\end{aligned}$$

同样得

$$\mathrm{Tr}(\rho_1\lg\rho_2)=\sum_{\alpha,\beta}a_\alpha\lg b_\beta\left|\langle\alpha|\beta\rangle\right|^2$$

所以

$$\text{不等式右边}=\sum_{\alpha,\beta}\left|\langle\alpha|\beta\rangle\right|^2\left(a_\alpha\lg b_\beta+b_\beta\lg a_\alpha\right)$$

注意$\sum_{\alpha}|\langle\alpha|\beta\rangle|^2=\sum_{\alpha}|\langle\alpha|\beta\rangle|^2=1$，于是

$$\begin{aligned}\text{不等式左边}&=\sum_{\alpha}a_\alpha\lg a_\alpha+\sum_{\beta}b_\beta\lg b_\beta\\&=\sum_{\alpha,\beta}a_\alpha(\lg a_\alpha)|\langle\alpha|\beta\rangle|^2+\sum_{\alpha,\beta}b_\beta(\lg b_\beta)|\langle\alpha|\beta\rangle|^2\\&=\sum_{\alpha,\beta}|\langle\alpha|\beta\rangle|^2(a_\alpha\lg a_\alpha+b_\beta\lg b_\beta)\end{aligned}$$

因为

$$a_\alpha\lg a_\alpha+b_\beta\lg b_\beta\geqslant a_\alpha\lg b_\beta+b_\beta\lg a_\alpha$$

所以

$$\text{左边}\geqslant\text{右边}$$

证毕.

10.48　von Neumann 熵的上限为 S(ρ)≤lgD

题 10.48　证明 von Neumann 熵的上限. 如果ρ有D个不为零的本征值，于是将有

$$S(\rho)\leqslant\lg D$$

等号在所有非零本征值均相等时成立.

证明

$$S(\rho)=-\mathrm{Tr}(\rho\lg\rho)=-\sum_i\lambda_i\lg\lambda_i=\sum_{i=1}^{D}\lambda_i\lg\frac{1}{\lambda_i}\leqslant\lg\left(\sum_{i=1}^{D}\lambda_i\frac{1}{\lambda_i}\right)=\lg D$$

这里利用了对数函数的凸性，故有

$$\lg(p_1x_1+p_2x_2)\geqslant(p_1\lg x_1+p_2\lg x_2),\quad p_1+p_2=1,\quad p_1,p_2>0$$

而当$\lambda_i=\dfrac{1}{D}$，即ρ的所有本征值均相等时，有

$$S(\rho)=\sum_{i=1}^{D}\lambda_i\lg\frac{1}{\lambda_i}=D\frac{1}{D}\lg D=\lg D$$

故不等式的等号成立. 这时$S(\rho)=\mathrm{Max}$. 因为这时ρ必为$\rho=\dfrac{1}{D}I_D$，其中

$$I_D=\begin{pmatrix}1&0&0&0&0&0\\0&\ddots&0&0&0&0\\0&0&1&0&0&0\\0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&\ddots&0\\0&0&0&0&0&0\end{pmatrix}$$

为D维单位矩阵.

10.49 von Neumann 熵的凸性

题 10.49 证明 von Neumann 熵的凸性(concavity)

$$S\left(\sum_{i=1}^{n}\alpha_i\rho_i\right)\geqslant\sum_{i=1}^{n}\alpha_i S(\rho_i)$$

这一性质十分重要，下面给出三种证明.

证法一 这也是对数函数凸性的体现. 假如利用次可加性，证明将相当简洁. 附加一个量子系统，使得 $\rho'=\rho^{AB}=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i\rho_i\otimes|i\rangle\langle i|$ 可以成块对角. 于是

$$S(\rho')=S\left(\sum_{i=1}^{n}\alpha_i\rho_i\right)+H(p_i)\leqslant S\left(\rho^A\right)+S\left(\rho^B\right)=S(\rho)+H(p_i)$$

于是，有

$$S\left(\sum_{i=1}^{n}\alpha_i\rho_i\right)\geqslant\sum_{i=1}^{n}\alpha_i S(\rho_i)$$

证法二 证此式之前，先引入引理.

引理 如果函数 $f(x)$ 是凸的，即它有下述性质

$$f(\lambda x+(1-\lambda)y)\geqslant\lambda f(x)+(1-\lambda)f(y),\qquad 0\leqslant\lambda\leqslant 1$$

对于定义域内任意 x,y 都成立. 可以将此性质推广至矩阵求迹形式. 即，对任意两个 Hermite 矩阵 $\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}$，有以下不等式成立

$$\mathrm{Tr}\left(f\left(\lambda\boldsymbol{a}+(1-\lambda)\boldsymbol{b}\right)\right)\geqslant\lambda\mathrm{Tr}f(\boldsymbol{a})+(1-\lambda)\mathrm{Tr}f(\boldsymbol{b}),\qquad 0\leqslant\lambda\leqslant 1$$

证明 Hermite 矩阵可以用幺正矩阵对角化，设 $\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}$ 可分别对角化为 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$，很明显 $\lambda\boldsymbol{a}+(1-\lambda)\boldsymbol{b}$ 也可以被某个幺正矩阵 $\boldsymbol{\Omega}$ 对角化，于是有下式成立

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}\left(f\left(\lambda\boldsymbol{a}+(1-\lambda)\boldsymbol{b}\right)\right)&=\mathrm{Tr}\left(f\left(\boldsymbol{\Omega}\left[\lambda\boldsymbol{a}+(1-\lambda)\boldsymbol{b}\right]\boldsymbol{\Omega}^{\dagger}\right)\right)\\&=\mathrm{Tr}\left(f\left(\lambda\boldsymbol{\Omega NAN}^{\dagger}\boldsymbol{\Omega}^{\dagger}+(1-\lambda)\boldsymbol{\Omega MBM}^{\dagger}\boldsymbol{\Omega}^{\dagger}\right)\right)\\&\equiv\mathrm{Tr}\left(f\left(\lambda\boldsymbol{UAU}^{\dagger}+(1-\lambda)\boldsymbol{VBV}^{\dagger}\right)\right)\end{aligned}$$

这里的 $\lambda\boldsymbol{UAU}^{\dagger}+(1-\lambda)\boldsymbol{VBV}^{\dagger}$ 已经是对角阵. 故有

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}\left(f\left(\lambda\boldsymbol{UAU}^{\dagger}+(1-\lambda)\boldsymbol{VBV}^{\dagger}\right)\right)&=\sum_i f\left(\sum_j\left(\lambda A_{jj}\left|U_{ji}\right|^2+(1-\lambda)B_{ii}\left|V_{ji}\right|^2\right)\right)\\&\geqslant\sum_i\lambda f\left(\sum_j A_{jj}\left|U_{ji}\right|^2\right)+(1-\lambda)f\left(\sum_j B_{ii}\left|V_{ji}\right|^2\right)\\&\geqslant\lambda\sum_{i,j}\left|U_{ji}\right|^2 f\left(A_{jj}\right)+(1-\lambda)\sum_{i,j}\left|V_{ji}\right|^2 f\left(B_{ii}\right)\end{aligned}$$

$$= \lambda \sum_j f(A_{jj}) + (1-\lambda) \sum_i f(B_{ii})$$

$$= \lambda f(a) + (1-\lambda) f(b)$$

于是引理得证.

这个结果可以立即推广到一般情况

$$\mathrm{Tr}\left(f\left(\sum_i \lambda_i a_i\right)\right) \geqslant \sum_i \lambda_i \mathrm{Tr} f(a_i), \qquad \lambda_i \geqslant 0, \qquad \sum_i \lambda_i = 1$$

于是由 Shannon 熵的凸性，立即知道 von Neumann 熵也具有凸性.

证法三 暂令 $n=2$，于是需要求证

$$S(\alpha_1\rho_1 + \alpha_2\rho_2) \geqslant (\alpha_1 S(\rho_1) + \alpha_2 S(\rho_2))$$

$$左边 = -\mathrm{Tr}\left[(\alpha_1\rho_1 + \alpha_2\rho_2)\lg(\alpha_1\rho_1 + \alpha_2\rho_2)\right]$$

$$令\ \alpha_1 = \frac{1}{2} + \gamma, \alpha_2 = \frac{1}{2} - \gamma, \gamma = \frac{1}{2}(\alpha_1 - \alpha_2)$$

$$左边 \geqslant -\mathrm{Tr}\left\{\left[\left(\frac{1}{2}+\gamma\right)\rho_1 + \left(\frac{1}{2}-\gamma\right)\rho_2\right]\left[\left(\frac{1}{2}+\gamma\right)\lg\rho_1 + \left(\frac{1}{2}-\gamma\right)\lg\rho_2\right]\right\}$$

$$= -\mathrm{Tr}\left\{\left(\frac{1}{2}+\gamma\right)^2 \rho_1\lg\rho_1 + \left(\frac{1}{2}-\gamma\right)^2 \rho_2\lg\rho_2 + \left(\frac{1}{4}-\gamma^2\right)\left[\rho_2\lg\rho_1 + \rho_1\log\rho_2\right]\right\}$$

由于 $A^A B^B \geqslant A^B B^A$，等号只当 $A = B$ 时成立. 对此不等式两边取对数得

$$-(A\lg A + B\lg B) \leqslant -(B\lg A + A\lg B)$$

即

$$-\mathrm{Tr}(\rho_2\lg\rho_1 + \rho_1\lg\rho_2) \geqslant -\mathrm{Tr}(\rho_1\lg\rho_1 + \rho_2\lg\rho_2)$$

再注意$\left(\frac{1}{4}-\gamma^2\right) = \alpha_1\alpha_2 \geqslant 0$，得

$$左边 \geqslant -\mathrm{Tr}\left\{\left(\frac{1}{2}+\gamma\right)^2 \rho_1\lg\rho_1 + \left(\frac{1}{2}-\gamma\right)^2 \rho_2\lg\rho_2 + \left(\frac{1}{4}-\gamma^2\right)\left[\rho_1\lg\rho_1 + \rho_2\lg\rho_2\right]\right\}$$

$$= -\mathrm{Tr}\left\{\left(\frac{1}{4}+\gamma+\gamma^2+\frac{1}{4}-\gamma^2\right)\rho_1\lg\rho_1 + \left(\frac{1}{4}-\gamma+\gamma^2+\frac{1}{4}-\gamma^2\right)\rho_2\lg\rho_2\right\}$$

$$= -\mathrm{Tr}\left\{\left(\frac{1}{2}+\gamma\right)\rho_1\lg\rho_1 + \left(\frac{1}{2}-\gamma\right)\rho_2\lg\rho_2\right\} = \alpha_1 S(\rho_1) + \alpha_2 S(\rho_2)$$

这个证明可以继续下去，即得 n 项的一般情况.

10.50 任意两体纯态ρ_{AB}存在纠缠的充要条件是条件熵 $S(A|B)<0$

题 10.50 命题：设 ρ_{AB} 是任意两体纯态，证明 ρ_{AB} 有量子纠缠存在的充要条件是条件熵 $S(A|B) < 0$.

证明 先假设纯态 ρ_{AB} 有纠缠，则它的 Schmidt 分解至少有两项，如下

$$|\psi\rangle_{AB}=\sum_i\sqrt{p_i}|i\rangle_A|i'\rangle_B$$

也即至少有两个$0<p_1<1,\ 0<p_2<1$，$p_1+p_2=1$，

$$\rho_B=Tr_A\left(|\psi\rangle_{AB\,AB}\langle\psi|\right)=\sum_i p_i|i'\rangle_{B\,B}\langle i'|$$

此时条件熵为

$$S(A|B)=S\left(|\psi\rangle_{AB\,AB}\langle\psi|\right)-S(\rho_B)=0-\sum_i p_i\log p_i<0$$

其次，如果纯态ρ_{AB}没有纠缠，即$\rho_{AB}=\rho_A\otimes\rho_B$，各自都是纯态，显然此时条件熵等于零.

10.51 证明正交投影测量必增加熵

题 10.51 证明：正交投影测量必增加熵. 只有当测量不改变态时，熵才不变.

证法一 设$\boldsymbol{\rho}$在自身表象$\boldsymbol{\rho}=\sum_i\alpha_i|i\rangle\langle i|$，$\langle i|j\rangle=\delta_{ij}$. 则

$$S(\boldsymbol{\rho})=-\sum_i\alpha_i\lg\alpha_i$$

而另一方面

$$A=\sum_y a_y|a_y\rangle\langle a_y|$$

$$p(a_y)\equiv p(y)=\langle a_y|\rho|a_y\rangle=\sum_i\alpha_i\langle a_y|i\rangle\langle i|a_y\rangle$$

我们知道函数$f(x)=-x\lg x$是凸函数，利用它的凸性，我们有

$$f\left(\sum_i p_i\alpha_i\right)=-\left(\sum_i p_i\alpha_i\right)\lg\left(\sum_i p_i\alpha_i\right)\geqslant-\sum_i p_i\alpha_i\lg\alpha_i\equiv\sum_i p_i f(\alpha_i),\quad\sum_i p_i=1$$

于是有

$$\begin{aligned}H(Y)&\equiv-\sum_y p(y)\lg p(y)=-\sum_y\left(\sum_i\alpha_i\langle a_y|i\rangle\langle i|a_y\rangle\right)\lg\left(\sum_j\alpha_j\langle a_y|j\rangle\langle j|a_y\rangle\right)\\&\geqslant-\sum_y\left(\sum_i\alpha_i\langle a_y|i\rangle\langle i|a_y\rangle\lg\alpha_i\right)=-\sum_i\alpha_i\lg\alpha_i\sum_y\langle i|a_y\rangle\langle a_y|i\rangle=-\sum_i\alpha_i\lg\alpha_i\\&=S(\rho)\end{aligned}$$

从证明过程可以看出，若A和$\boldsymbol{\rho}$有共同的本征矢量，则$S(\boldsymbol{\rho})=H(Y)_{\min}$——可对易测量(所得 Shannon 熵)不引入附加熵值. 物理上这是说，假如我们选择和密度矩阵对易的力学量算符作测量，则测量结果所引入的随机性减至最小($H(Y)$最小为$S(\boldsymbol{\rho})$). 但是，假如我们测量一个“坏”的力学量，结果的可预计程度就会下降.

在数学上这是说，在任何基矢中用零来代替$\boldsymbol{\rho}$的非对角矩阵元时，$S(\boldsymbol{\rho})$将增加. 注意，在力学量A的表象$\{|a_y\rangle\}$中，

$$\boldsymbol{\rho}=\sum_i\alpha_i|i\rangle\langle i|\Rightarrow\begin{cases}\rho_{yy}=\langle a_y|\boldsymbol{\rho}|a_y\rangle\\\rho_{yy'}=\langle a_y|\boldsymbol{\rho}|a_{y'}\rangle=\sum_i\alpha_i\langle a_y|i\rangle\langle i|a_{y'}\rangle\end{cases}$$

于是，若略去 ρ 中的非对角项 $\rho_{yy'}$，只剩对角项 ρ_{yy}，则

$$S(\rho)\to-\sum_y p(y)\lg p(y)=H(Y)$$

就是说，不论在什么基中，略去 $\boldsymbol{\rho}$ 中的非对角项将使 von Neumann 熵增加.

证法二　将问题表达得更清楚些：假定密度矩阵为 $\boldsymbol{\rho}$，正交测量的正交完备投影算符系列为 P_i，则在测量前后，ν 的变化为

$$\boldsymbol{\rho}\to\boldsymbol{\rho}'=\sum_i P_i\boldsymbol{\rho}P_i$$

可证此时熵的改变为

$$S(\boldsymbol{\rho}')\geqslant S(\boldsymbol{\rho})$$

等号当也只当 $\boldsymbol{\rho}'=\boldsymbol{\rho}$ 时成立. 对此证明如下.

将 Klein 不等式(量子相对熵是非负的)应用到 $\boldsymbol{\rho}',\boldsymbol{\rho}$ 上，有

$$0\leqslant S(\boldsymbol{\rho}'\|\boldsymbol{\rho})=-S(\boldsymbol{\rho})-\mathrm{Tr}(\boldsymbol{\rho}\lg\boldsymbol{\rho}')$$

此时只要证明 $-\mathrm{Tr}(\boldsymbol{\rho}\lg\boldsymbol{\rho}')=S(\boldsymbol{\rho}')$ 就可以了. 为此，利用完备性条件和投影算符性质：$\sum_i P_i=I$ 和 $P_i^2=P_i$，以及求迹的循环性质，有

$$-\mathrm{Tr}(\boldsymbol{\rho}\lg\boldsymbol{\rho}')=-\mathrm{Tr}\left(\sum_i P_i\boldsymbol{\rho}\lg\boldsymbol{\rho}'\right)=-\mathrm{Tr}\left(\sum_i P_i\boldsymbol{\rho}\lg\boldsymbol{\rho}'P_i\right)$$

注意，$P_iP_j=\delta_{ij}$，$\boldsymbol{\rho}'P_i=P_i\boldsymbol{\rho}P_i=P_i\boldsymbol{\rho}'$，就是说 $[P_i,\boldsymbol{\rho}']=0$，于是 P_i 和 $\lg\boldsymbol{\rho}'$ 也对易. 所以，

$$-\mathrm{Tr}(\boldsymbol{\rho}\lg\boldsymbol{\rho}')=-\mathrm{Tr}\left(\sum_i P_i\boldsymbol{\rho}P_i\lg\boldsymbol{\rho}'\right)=-\mathrm{Tr}(\boldsymbol{\rho}'\lg\boldsymbol{\rho}')\equiv S(\boldsymbol{\rho}')$$

证毕.

10.52　两体熵有次可加性

题 10.52　考虑一个处在态 ρ_{AB} 上的双粒子系统 $A\otimes B$. 证明两体熵有如下式定义的次可加性

$$S(\rho_{AB})\leqslant S(\rho_A)+S(\rho_B)$$

等号当也只当两个子系统无关联时成立.

于是，对不关联的两个系统，它们熵是可加的；但若关联，则整个系统的熵小于两部分熵之和. 就是说，量子纠缠(或者说量子关联)使系统的 von Neumann 熵减少. 这个性质类似于 Shannon 熵性质

$$H(X,Y)\leqslant H(X)+H(Y)$$

(或 $I(X;Y)\geqslant0$). 这是因为，在 XY (或 AB)系统中的某些信息已经编码在 X 和 Y (A 和 B)之间的(经典或量子)关联里了.

证明　首先看 A 和 B 无关联的情况.

$$\rho_{AB}=\rho_A\otimes\rho_B$$

所以

$$\begin{aligned}S(\rho_{AB})&=-\mathrm{Tr}\left[(\rho_A\otimes\rho_B)\lg(\rho_A\otimes\rho_B)\right]\\&=-\mathrm{Tr}\left\{(\rho_A\otimes\rho_B)(\lg\rho_A+\lg\rho_B)\right\}\end{aligned}$$

$$=-\mathrm{Tr}_A(\rho_A \lg \rho_A)-Tr_B(\rho_B \lg \rho_B)=S(\rho_A)+S(\rho_B)$$

其次，如果有关联，关联将降低 $A\otimes B$ 系统的 von Neumann 熵，这导致不等式成立. 比如，极端而言，如果 $\rho_{AB}=|\psi\rangle_{AB\,AB}\langle\psi|$ 是两体纯态，按 Schmidt 分解得 $|\psi\rangle_{AB}=\sum_i\sqrt{p_i}|i\rangle_A|i'\rangle_B$，于是

$$\begin{cases}\rho_A=\sum_i p_i|i\rangle_{A\,A}\langle i| \\ \rho_B=\sum_i p_i|i'\rangle_{B\,B}\langle i'|\end{cases}$$

因此，$S(\rho_{AB})=S\left(|\psi\rangle_{AB\,AB}\langle\psi|\right)=0$，$S(\rho_A)=S(\rho_B)=H(p)=-\sum_i p_i \lg p_i \geqslant 0$. 不等式显然成立.

最后，一般情况，利用相对熵的非负性质($S(\rho|\sigma)=\mathrm{Tr}\left[\rho(\lg\rho-\lg\sigma)\right]\geqslant 0$)来证明这个次可加性最为简单

$$\begin{aligned}0\leqslant S(\rho_{AB}|\rho_A\otimes\rho_B)&=\mathrm{Tr}(\rho_{AB}\lg\rho_{AB})-\mathrm{Tr}\left[\rho_{AB}(\lg\rho_A\otimes\rho_B)\right]\\&=-S(\rho_{AB})-\mathrm{Tr}(\rho_{AB}\lg\rho_A)-\mathrm{Tr}(\rho_{AB}\lg\rho_B)\\&=-S(\rho_{AB})+S(\rho_A)+S(\rho_B)\end{aligned}$$

10.53 三体系统有 Araki-Lieb 不等式成立

题 10.53 证明对三体系统有三角不等式(Araki-Lieb 不等式)成立

$$S(\rho_{AB})\geqslant\left|S(\rho_A)-S(\rho_B)\right|$$

证明 对特殊情况作一些验证

(1) 当 AB 为纯态时，Schmidt 分解

$$\begin{cases}|\psi\rangle_{AB}=\sum_i\sqrt{p_i}|i\rangle_A|i'\rangle_B \\ \rho_A=\sum_i p_i|i\rangle_A;\quad \rho_B=\sum_i p_i|i'\rangle_B\end{cases}$$

于是得

$$0\geqslant\left|-\sum_i p_i\lg p_i+\sum_i p_i\lg p_i\right|=0$$

(2) 而当 AB 为可分离态时，也有

$$\rho_{AB}=\rho_A\otimes\rho_B$$

$$S(\rho_{AB})=S(\rho_A)+S(\rho_B)\geqslant\left|S(\rho_A)-S(\rho_B)\right|$$

下面对普遍情况做证明.

假定态 $\rho_{AB}=\mathrm{Tr}_R|\psi\rangle_{ABR\,ABR}\langle\psi|$，利用次可加性得到

$$S(\rho_R)+S(\rho_A)\geqslant S(\rho_{A,R})$$

这里 $\rho_R=\mathrm{Tr}_{A,B}|\psi\rangle_{ABR\,ABR}\langle\psi|$，$\rho_A=\mathrm{Tr}_{R,B}|\psi\rangle_{ABR\,ABR}\langle\psi|$，$\rho_{A,R}=\mathrm{Tr}_B|\psi\rangle_{ABR\,ABR}\langle\psi|$.

由于$|\psi\rangle_{ABR\,ABR}\langle\psi|$是纯态，所以$S(\rho_R)=S(\rho_{A,B})$，$S(\rho_{A,R})=S(\rho_B)$，代入即得到 Araki-Lieb 不等式.

10.54　证明广义 Klein 不等式成立

题 10.54　首先定义，如实变数x的可微实函数$f(x)$对所有x和y，都有

$$f(y)-f(x)\leqslant(y-x)f'(x)$$

就说此函数是凸的. 举个例子，函数$f(x)=-x\lg x$当$x>0$时就是凸的. 因为将它代入此式中，得(对于$y>0$，因运算中两边已同除以y)，$\lg\frac{x}{y}\leqslant\frac{x}{y}-1$. 此式当$x>y>0$时是成立的，因为有不等式$\lg(1+X)<X$ ($X>0$).

将上面定义式推广到矩阵求迹形式. 证明：对任何两个不一定对易的n维 Hermite 矩阵$\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{b}$ (其中$\boldsymbol{b}$是完全正的)，有如下"广义 Klein 不等式"成立：

$$\mathrm{Tr}\big(f(\boldsymbol{b})-f(\boldsymbol{a})\big)\leqslant\mathrm{Tr}\big((\boldsymbol{b}-\boldsymbol{a})f'(\boldsymbol{a})\big)$$

证法一　设$\boldsymbol{a}$和$\boldsymbol{b}$的本征值分别为$\{\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_n\}$和$\{\beta_1,\beta_2,\cdots,\beta_n\}$.

将这两组数分别按降序排列，得到新的两组数$\{\alpha_1',\alpha_2',\cdots,\alpha_n'\}$和$\{\beta_1',\beta_2',\cdots,\beta_n'\}$于是令上面的$x$、$y$值取这里的本征值$\alpha_i'$、$\beta_i'$，利用函数$f(x)$的凸性，有

$$\begin{cases}f(\beta_1')-f(\alpha_1')\leqslant(\beta_1'-\alpha_1)f'(\alpha_1')\\ \qquad\cdots\\ f(\beta_n')-f(\alpha_n')\leqslant(\beta_n'-\alpha_n')f'(\alpha_n')\end{cases}$$

将这n个方程求和，注意有

$$\sum_{i=1}^{n}f(\alpha_i')=\sum_{i}^{n}f(\alpha_i)=\mathrm{Tr}f(\boldsymbol{a})$$

$$\sum_{i=1}^{n}\alpha_i'f'(\alpha_i')=\sum_{i}^{n}\alpha_if'(\alpha_i)=\mathrm{Tr}\big[\boldsymbol{a}f'(\boldsymbol{a})\big]$$

$$\sum_{i}^{n}f(\beta_i')=\sum_{i=1}^{n}f(\beta_i)=\mathrm{Tr}f(\boldsymbol{b})$$

于是得

$$\mathrm{Tr}\big[f(\boldsymbol{a})-f(\boldsymbol{b})\big]\leqslant\sum_{i=1}^{n}\beta_i'f'(\alpha'_i)-\mathrm{Tr}\big[\boldsymbol{a}f'(\boldsymbol{a})\big]$$

设矩阵$\boldsymbol{a}$可以被幺正矩阵U对角化，则另有下式成立

$$\mathrm{Tr}\big(\boldsymbol{b}f'(\boldsymbol{a})\big)=\mathrm{Tr}\Big(U\boldsymbol{b}U^{\dagger}f'\big(U\boldsymbol{a}U^{\dagger}\big)\Big)=\sum_{i}\big(U\boldsymbol{b}U^{\dagger}\big)_{ii}f'(\alpha_i)$$

由于$f(x)$是凸的，所以$f'(x)$是单调减函数，于是易知

$$\sum_{i=1}^{n}\beta_i'f'(\alpha_i')\leqslant\mathrm{Tr}\big[\boldsymbol{b}f'(\boldsymbol{a})\big]$$

即得矩阵求迹的推广形式.

证法二　设$\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}$可分别被幺正矩阵$\boldsymbol{U},\boldsymbol{V}$对角化，则有

$$\mathrm{Tr}\left[(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{a})f'(\boldsymbol{a})\right]=\mathrm{Tr}\left\{\boldsymbol{UV}^{\dagger}\begin{pmatrix}\beta_1 & & & \\ & \beta_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \beta_n\end{pmatrix}\boldsymbol{VU}^{\dagger}f'\left(\boldsymbol{UaU}^{\dagger}\right)-\boldsymbol{UaU}^{\dagger}f'\left(\boldsymbol{UaU}^{\dagger}\right)\right\}$$

$$\equiv\mathrm{Tr}\left\{\boldsymbol{\Omega}\begin{pmatrix}\beta_1 & & & \\ & \beta_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \beta_n\end{pmatrix}\boldsymbol{\Omega}^{\dagger}f'\left(\boldsymbol{UaU}^{\dagger}\right)-\boldsymbol{UaU}^{\dagger}f'\left(\boldsymbol{UaU}^{\dagger}\right)\right\}$$

$$=\sum_i\left(\sum_j\beta_j\left|\Omega_{ij}\right|^2\right)f'(\alpha_i)-\sum_i\alpha_i f'(\alpha_i)$$

$$\leqslant\sum_i f\left(\sum_j\beta_j\left|\Omega_{ij}\right|^2\right)-\sum_i f(\alpha_i)$$

$$\leqslant\sum_i\sum_j\left|\Omega_{ij}\right|^2 f(\beta_j)-\sum_i f(\alpha_i)$$

$$=\sum_j f(\beta_j)\sum_i\left|\Omega_{ij}\right|^2-\sum_i f(\alpha_i)$$

$$=\sum_j f(\beta_j)-\sum_i f(\alpha_i)=\mathrm{Tr}\left[f(b)-f(a)\right]$$

不等式得证.

10.55 体系两个密度矩阵的相对熵 $S(\boldsymbol{\rho}\|\boldsymbol{\sigma})$ 是非负的

题 10.55 体系的两个密度矩阵 $\boldsymbol{\rho}$ 对于 $\boldsymbol{\sigma}$ 的相对熵 $S(\boldsymbol{\rho}\|\boldsymbol{\sigma})$ 定义为

$$S(\boldsymbol{\rho}\|\boldsymbol{\sigma})=\mathrm{Tr}(\boldsymbol{\rho}\lg\boldsymbol{\rho})-\mathrm{Tr}(\boldsymbol{\rho}\lg\boldsymbol{\sigma})$$

证明它是非负的.

证明 首先，现对体系任何两个态 $\boldsymbol{\rho}$，$\boldsymbol{\sigma}$，定义 $f(\boldsymbol{\rho})\equiv-\boldsymbol{\rho}\lg\boldsymbol{\rho}$ 和 $f(\boldsymbol{\sigma})\equiv-\boldsymbol{\sigma}\lg\boldsymbol{\sigma}$. 由广义 Klein 不等式，有

$$-S(\boldsymbol{\rho}|\boldsymbol{\sigma})=\mathrm{Tr}\left[-\boldsymbol{\rho}(\lg\boldsymbol{\rho}-\lg\boldsymbol{\sigma})\right]=\mathrm{Tr}\left[f(\boldsymbol{\rho})-f(\boldsymbol{\sigma})+f(\boldsymbol{\sigma})+\boldsymbol{\rho}\lg\boldsymbol{\sigma}\right]$$

$$\leqslant\mathrm{Tr}\left[(\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\sigma})(-\lg\boldsymbol{\sigma}-1)-(\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{\rho})\log\boldsymbol{\sigma}\right]=\mathrm{Tr}(\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{\rho})=0$$

所以最后得到 $S(\boldsymbol{\rho}|\boldsymbol{\sigma})\geqslant 0$. 证毕.

另一证法，令

$$\boldsymbol{\rho}=\sum_i p_i|i\rangle\langle i| \text{ 和 } \boldsymbol{\sigma}=\sum_j q_j|j\rangle\langle j|$$

分别是 $\boldsymbol{\rho}$ 和 $\boldsymbol{\sigma}$ 的正交分解. 按相对熵定义得

$$S(\boldsymbol{\rho}|\boldsymbol{\sigma})=\sum_i p_i\lg p_i-\sum_i\langle i|\boldsymbol{\rho}\lg\boldsymbol{\sigma}|i\rangle$$

由于 $\langle i|\boldsymbol{\rho}=p_i\langle i|$，于是

$$\langle i|\lg\boldsymbol{\sigma}|i\rangle=\langle i|\left(\sum_j \lg q_j|j\rangle\langle j|\right)|i\rangle=\sum_j \lg q_j|\langle i|j\rangle|^2$$

所以得

$$S(\boldsymbol{\rho}|\boldsymbol{\sigma})=\sum_i p_i\left(\lg p_i-\sum_j|\langle i|j\rangle|^2\lg q_j\right)$$

注意$\sum_i|\langle i|j\rangle|^2=1,\sum_j|\langle i|j\rangle|^2=1$，并且由于 lg 函数是严格的凸函数，有

$$\sum_j|\langle i|j\rangle|^2\lg q_j\leqslant\lg\left(\sum_j|\langle i|j\rangle|^2 q_j\right)$$

这里等号当且仅当 j 只有一个值时成立，即$|\langle i|j\rangle|^2=1$时成立. 于是

$$S(\boldsymbol{\rho}|\boldsymbol{\sigma})\geqslant\sum_i p_i\lg\left(\frac{p_i}{\sum_j|\langle i|j\rangle|^2 q_j}\right)$$

这里等号也是当且仅当对每一个 i 都只有一个 j 值时成立. 此式类似于经典的相对熵，具有非负性质. 证毕.

10.56　非正交态的实验鉴别

题 10.56　非正交态的实验鉴别. Alice 已经制备她的 qubit 处于下面两个态之一上

$$|u\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\qquad |v\rangle=\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}\end{pmatrix}$$

这里$0<\theta<\pi$. Bob 知道θ数值，但不知道 Alice 制备的是两个态中的哪一个. 现在他选择所执行的测量，去做最好的判断，判断 Alice 所制备的是哪一个态. (1) 一个正交测量：$E_1=|u\rangle\langle u|,E_2=1-|u\rangle\langle u|$. (在这种情况下，假如 Bob 得到结果 2，他就知道 Alice 制备的必定是态$|v\rangle$) (2) 一组三个结果的 POVM

$$F_1=A(1-|u\rangle\langle u|),F_2=A(1-|v\rangle\langle v|),F_3=(1-2A)I+A(|u\rangle\langle u|+|v\rangle\langle v|)$$

这里 A 选取和 F_3 正定性相符合的最大数值. 这时，如果 Bob 得到结果 1 或 2，他就能断定 Alice 的制备，若得到结果 3，他将无法断定. (3) 一个正交测量 $E_1=|w\rangle\langle w|$, $E_2=1-|w\rangle\langle w|$，而

$$|w\rangle=\begin{pmatrix}\cos\left[\dfrac{1}{4}(\pi+\theta)\right]\\ \sin\left[\dfrac{1}{4}(\pi+\theta)\right]\end{pmatrix}$$

这里，自旋态$|w\rangle$的极化方向位于 $x-z$ 面内的$\frac{1}{2}(\pi+\theta)$方向，它垂直于$|u\rangle,|v\rangle$两个态极化

方向的均分角线.

在以上三种情况下，寻找 Bob 的平均信息增益 $I(\theta)$ (即制备和测量所得的互信息). 并指出，Bob 应当选用哪种测量?

解 假定 Alice 以相同概率制备初态，那么可以计算互信息如下.

(1) 测量前

$$\rho(x)=\frac{1}{2}|u\rangle\langle u|+\frac{1}{2}|v\rangle\langle v|=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1+\cos^2\frac{\theta}{2} & \sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\\ \sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2} & \sin^2\frac{\theta}{2}\end{pmatrix}$$

测量后

$$\rho(y)=E_1\rho(x)E_1+E_2\rho(x)E_2=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1+\cos^2\frac{\theta}{2} & 0\\ 0 & \sin^2\frac{\theta}{2}\end{pmatrix}$$

互信息

$$I(\theta)=H(x)+H(y)-H(x,y)$$

这里 $H(x,y)=S(p(x,y))$，$p(x,y)=p(x)p(y|x)$ 是测量前后态和测量结果的联合分布. 于是可以算出

$$I(\theta)=1-\frac{1}{2}\left(1+\cos\frac{\theta}{2}\right)\lg\left(1+\cos\frac{\theta}{2}\right)-\frac{1}{2}\left(1-\cos\frac{\theta}{2}\right)\lg\left(1-\cos\frac{\theta}{2}\right)$$
$$-\frac{1}{2}\left(1+\cos^2\frac{\theta}{2}\right)\lg\left(1+\cos^2\frac{\theta}{2}\right)+\frac{1}{2}\cos^2\frac{\theta}{2}\lg\cos^2\frac{\theta}{2}$$

同样方法可以算出(2)和(3)情况下的互信息，即可比较互信息的大小，来决定 Bob 应当选用哪种测量.

10.57 用 Peres-Wootters 方法对给定态构造 PGM 的 POVM

题 10.57 用 Peres-Wootters 方法对态 $\{|\Phi_\alpha\rangle\}=\{|\varphi_\alpha\rangle|\varphi_\alpha\rangle\}$ 构造 PGM(pretty good measurement)的 POVM. 其中

$$|\varphi_1\rangle=|\boldsymbol{n}_1\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\qquad |\varphi_2\rangle=|\boldsymbol{n}_2\rangle=\begin{pmatrix}-1/2\\ \sqrt{3}/2\end{pmatrix},\qquad |\varphi_3\rangle=|\boldsymbol{n}_3\rangle=\begin{pmatrix}-1/2\\ -\sqrt{3}/2\end{pmatrix}$$

(1) 若以先验的等概率 $\frac{1}{3}$ 的随机制备上面三个态，将此时密度矩阵 $\boldsymbol{\rho}=\frac{1}{3}\left(\sum_\alpha|\Phi_\alpha\rangle\langle\Phi_\alpha|\right)$ 表示成 Bell 基展开的形式，并计算 $S(\boldsymbol{\rho})$；(2) 由三个 $\{|\Phi_\alpha\rangle\}$ 构造 PGM. 这时 PGM 是正交测量. 用 Bell 基形式表示 PGM 基的元素；(3) 计算 PGM 结局和制备的互信息.

证明 (1) 其实，$S(\boldsymbol{\rho})$ 计算可用求 ρ_{AB} 本征值的办法，现按题意办法求.

首先将态 $\{|\Phi_\alpha\rangle\}=\{|\varphi_\alpha\rangle|\varphi_\alpha\rangle\}$ 用 Bell 基展开，得到

$$|\Phi_1\rangle = |\varphi_1\rangle|\varphi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\phi^+\rangle + |\phi^-\rangle\right)$$

$$|\Phi_2\rangle = |\varphi_2\rangle|\varphi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\phi^+\rangle - \frac{1}{2}|\phi^-\rangle\right) + \frac{\sqrt{6}}{4}|\psi^+\rangle$$

$$|\Phi_3\rangle = |\varphi_3\rangle|\varphi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\phi^+\rangle - \frac{1}{2}|\phi^-\rangle\right) - \frac{\sqrt{6}}{4}|\psi^+\rangle$$

于是得

$$\rho = \frac{1}{3}\left(\sum_\alpha |\Phi_\alpha\rangle\langle\Phi_\alpha|\right)$$

$$= \frac{1}{2}|\phi^+\rangle\langle\phi^+| + \frac{1}{4}|\phi^-\rangle\langle\phi^-| + \frac{1}{4}|\psi^+\rangle\langle\psi^+|$$

$$S(\rho) = -\frac{1}{2}\lg\frac{1}{2} - \frac{1}{4}\lg\frac{1}{4} - \frac{1}{4}\lg\frac{1}{4} = 3/2$$

(2) 定义 $G = \sum_\alpha |\Phi_\alpha\rangle\langle\Phi_\alpha|$，则 PGM 易求得如下

$$F_1 = G^{-1/2}|\Phi_1\rangle\langle\Phi_1|G^{-1/2} = \frac{1}{3}\left(|\phi^+\rangle + \sqrt{2}|\phi^-\rangle\right)\left(\langle\phi^+| + \sqrt{2}\langle\phi^-|\right)$$

$$F_2 = G^{-1/2}|\Phi_2\rangle\langle\Phi_2|G^{-1/2} = \frac{1}{3}\left(|\phi^+\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|\phi^-\rangle + \frac{\sqrt{6}}{2}|\psi^+\rangle\right)\left(\langle\phi^+| - \frac{1}{\sqrt{2}}\langle\phi^-| + \frac{\sqrt{6}}{2}\langle\psi^+|\right)$$

$$F_3 = G^{-1/2}|\Phi_3\rangle\langle\Phi_3|G^{-1/2} = \frac{1}{3}\left(|\phi^+\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|\phi^-\rangle - \frac{\sqrt{6}}{2}|\psi^+\rangle\right)\left(\langle\phi^+| - \frac{1}{\sqrt{2}}\langle\phi^-| - \frac{\sqrt{6}}{2}\langle\psi^+|\right)$$

(3) PGM 测量结果如下

$$F_\beta|\Phi_\alpha\rangle\langle\Phi_\alpha|F_\beta^\dagger = p_{\alpha\beta}F_\beta = \begin{cases} \frac{1}{3}\left(1+\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 F_\beta, & \alpha=\beta \\ \frac{1}{6}\left(1-\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 F_\beta, & \alpha\neq\beta \end{cases}$$

互信息可算得如下

$$I = H(X) - H(X|Y) = 3/2 - H(p_{\alpha\beta}) = 1.36907$$

第 11 章　其　　他

11.1　将 $e^{i\alpha\sigma_y}$ 表示为 2×2 矩阵

题 11.1　将 $\exp\left[\begin{pmatrix} 0 & a \\ -a & 0 \end{pmatrix}\right]$ 表示为 2×2 矩阵；α 是一个正的常数.

解法一　令

$$S(a)\equiv\exp\left[\begin{pmatrix} 0 & a \\ -a & 0 \end{pmatrix}\right]=\exp\left[a\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}\right]\equiv e^{aA},\qquad A\equiv\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

显然有

$$A^2=\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}=-\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}=-I$$

$$\frac{d}{da}S(a)=AS(a)$$

$$\frac{d^2}{da^2}S(a)=A^2S(a)=-S(a)$$

所以

$$S''(a)+S(a)=0$$

通解为

$$S(\alpha)=c_1e^{i\alpha}+c_2e^{-i\alpha}$$

初始条件

$$S(0)=I,\qquad S'(0)=A$$

得

$$\begin{cases} c_1+c_2=I, \\ c_1-c_2=-iA, \end{cases}\quad 即\quad \begin{cases} c_1=\dfrac{I-iA}{2} \\ c_2=\dfrac{I+iA}{2} \end{cases}$$

所以

$$\begin{aligned} S(a)&=\frac{I-iA}{2}e^{ia}+\frac{I+iA}{2}e^{-ia}=\frac{I}{2}(e^{ia}+e^{-ia})+\frac{iA}{2}(e^{-ia}-e^{ia})=I\cos a+A\sin a \\ &=\begin{pmatrix} \cos a & \sin a \\ -\sin a & \cos a \end{pmatrix} \end{aligned}$$

解法二　令

$$A=\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

由于

$$A^2 = -\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = -I$$

$$A^3 = -A, \qquad A^4 = I$$

所以

$$\mathrm{e}^{aA} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n A^n}{n!} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{a^{2k}(-1)^k}{(2k)!} I + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{a^{2k+1}(-1)^k}{(2k+1)!} A$$

$$= \cos aI + \sin aA = \begin{pmatrix} \cos a & \sin a \\ -\sin a & \cos a \end{pmatrix}$$

11.2 几个数学题

题 11.2 (1) 求和 $y = 1 + 2x + 3x^2 + 4x^3 + \cdots$，$|x| < 1$. (2) 如果在区域 $0 < x < \infty$ 上 $f(x) = x\mathrm{e}^{-x/\lambda}$，试求 x 的平均值和最可几值($f(x)$ 为 x 的概率密度). (3) 计算 $I = \int_0^{\infty} \frac{\mathrm{d}x}{4 + x^4}$. (4) 求下面矩阵的本征值和归一化的本征矢量

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 4 \\ 2 & 3 & 0 \\ 5 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

这些本征矢量正交吗？试加以评论.

解 (1) 当 $|x| < 1$ 时

$$y - xy = 1 + x + x^2 + x^3 + \cdots = \frac{1}{1-x}$$

所以

$$y = \frac{1}{(1-x)^2}, \qquad |x| < 1$$

(2)

$$\bar{x} = \frac{\int_0^{\infty} xf(x)\mathrm{d}x}{\int_0^{\infty} f(x)\mathrm{d}x} = \frac{\int_0^{\infty} x \cdot x\mathrm{e}^{-x/\lambda}\mathrm{d}x}{\int_0^{\infty} x\mathrm{e}^{-x/\lambda}\mathrm{d}x} = \lambda \frac{\Gamma(3)}{\Gamma(2)} = 2\lambda$$

由

$$f'(x) = \mathrm{e}^{-x/\lambda} - \frac{1}{\lambda} x\mathrm{e}^{-x/\lambda} = 0$$

得

$$x = \lambda \quad 或 \quad x \to \infty$$

由

$$f''(\lambda) = -\frac{1}{\lambda}\mathrm{e}^{-1} < 0, \qquad f(\lambda) = \lambda\mathrm{e}^{-1} > \lim_{x\to\infty} f(x) = 0$$

知当 $x = \lambda$ 时，概率密度 $f(x)$ 最大，所以 x 的最可几值为 λ.

(3) 如题图 11.2 所示沿围道 C 积分，当 $R \to \infty$ 时

$$\int_{C_2} \frac{dz}{4+z^4} \to 0$$

$$\int_{C_1} \frac{dz}{4+z^4} + \int_{C_2} \frac{dz}{4+z^4} \to \int_{-\infty}^{0} \frac{dz}{4+z^4} + \int_{0}^{+\infty} \frac{dz}{4+z^4} = 2\int_{0}^{+\infty} \frac{dx}{4+x^4}$$

$$\oint_C \frac{dz}{4+z^4} = 2\pi i\left[\mathrm{Res}(1+i) + \mathrm{Res}(-1+i)\right] = 2\pi i\left(-\frac{1+i}{16} - \frac{-1+i}{16}\right) = \frac{\pi}{4}$$

所以

$$2\int_0^{\infty} \frac{dx}{4+x^4} = \frac{\pi}{4}$$

$$\int_0^{\infty} \frac{dx}{4+x^4} = \frac{\pi}{8}$$

(4) 设此矩阵本征值为 E，本征矢量为

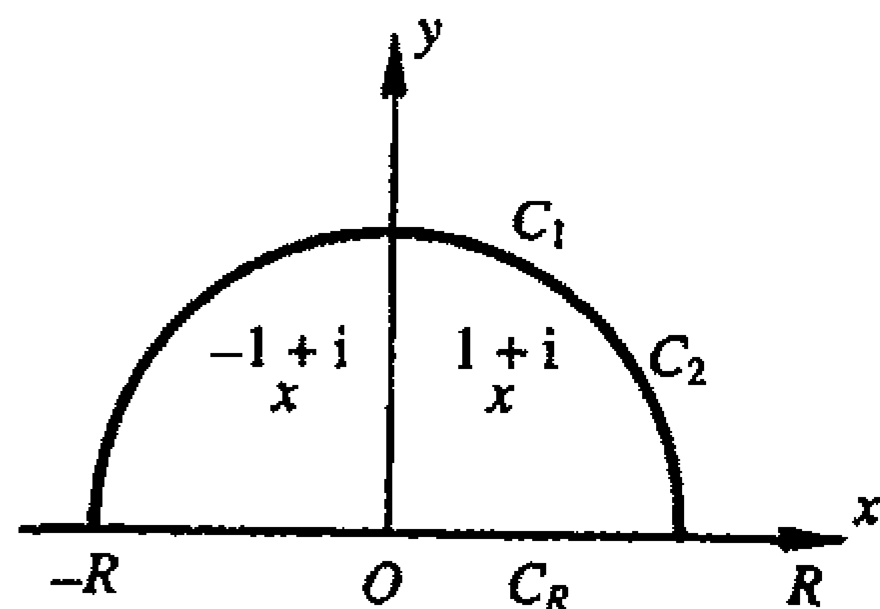
$$X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

则有

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 4 \\ 2 & 3 & 0 \\ 5 & 0 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \tag{A}$$

要使 X 有非零解，则需

$$\begin{vmatrix} E-1 & -2 & -4 \\ -2 & E-3 & 0 \\ -5 & 0 & E-3 \end{vmatrix} = 0 \tag{1}$$



题图 11.2

解得

$$E_1 = 3, \qquad E_2 = -3, \qquad E_3 = 7$$

将 E 值代入方程(1)，可得对应于 $E_1 = 3$ 的一个归一化本征矢量 X_1

$$X_1 = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix}$$

同理可得

$$X_2 = \frac{1}{\sqrt{65}} \begin{pmatrix} -6 \\ 2 \\ 5 \end{pmatrix}, \qquad X_3 = \frac{1}{3\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \\ 5 \end{pmatrix}$$

这些本征值之间不正交.

一般对于 Hermite 矩阵，属于不同本征值的本征矢量正交.

11.3 z 轴的 S_z 的本征态，在取 z' 轴上 S 的各种投影值的概率

题 11.3 自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子处于 $S_z=-\frac{1}{2}$ 的态中，求自旋在 z' 轴上的投影取各种可能值的概率，已知 z' 轴和原来的 z 轴的夹角为 θ 角.

解 量子力学中微观力学量的平均值一般具有经典力学的性质. 因此处于 $S_z=+\frac{1}{2}$ 的自旋态的粒子，其自旋矢量的平均显然沿 z 轴，其数值为 $+\frac{1}{2}$. 将它投影到 z' 轴，可得自旋沿 z' 轴的平均值为 $\langle S_{z'}\rangle=+\frac{1}{2}\cos\theta$. 另一方面由概率理论及考虑到自旋在 z' 轴上投影只能有两种可能值，因此有

$$\langle S_{z'}\rangle=P_+\cdot\frac{1}{2}+P_-\left(-\frac{1}{2}\right)=\frac{1}{2}\cos\theta$$

式中 P_+，P_- 分别为在 z' 轴上自旋分量取 $+\frac{1}{2}$ 与 $-\frac{1}{2}$ 的概率. 再考虑到 $P_++P_-=1$，易得到

$$P_+=\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right),\qquad P_-=\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

11.4 科学家对物理学所作的贡献

题 11.4 请简要指出与下面这些名字有关的人对物理学所做的贡献(用一句话). 如果可能的话，请写出适当的方程式. (1) Franck-Hertz；(2) Davisson-Germer；(3) Breit-Wigner；(4) Hartree-Fock；(5) Lee-Yang；(6) duLong-Petit；(7) Cockcroft-Walton；(8) Hahn-Strassmann；(9) Ramsauer-Townsend；(10) Thomas-Fermi.

答 (1) Franck-Hertz 用实验验证了原子的能级是分立的；

(2) Davisson-Germer 在实验上发现了电子的衍射现象；

(3) Breit-Wigner 发现了原子核物理中的 Breit-Wigner 散射公式；

(4) Hartree-Fock 发展了一套自洽场方法，称为 Hartree-Fock 自洽场方法；

(5) Lee-Yang 推翻了弱作用中宇称守恒定律；

(6) duLong-Petit 发现了在高温下固体比热为 $3R$ 的规律(摩尔比热容)；

(7) Cockcroft-Walton 发明了静电加速器；

(8) Hahn-Strassmann 首先发现了原子核的裂变现象；

(9) Ramsauer-Townsend 首先发现了原子的共振透射现象；

(10) Thomas-Fermi 提出了金属结构的称为 Thomas-Fermi 近似的统计模型.

11.5 Galileo 变换下波函数的变换规律

题 11.5 试求 Galileo 变换下波函数的变换规律.

解 先考虑一个自由运动粒子的波函数在 Galileo 变换下的变换规律.

设有参考系 k 和 k'，其中 k' 系相对 k 系以速度 v 作匀速运动. 同一个自由运动粒子在两个惯性系中都表示为平面波

$$\psi = A e^{\frac{i}{\hbar}(p \cdot r - Et)}, \qquad \psi' = A e^{\frac{i}{\hbar}(p' \cdot r' - E't)} \tag{1}$$

式中，A 为归一化常数，由于两个惯性系中存在关系，$r' = r + vt$, 所以从两个惯性系的动量和能量具有下列关系

$$p = p' + mv, \qquad E = \frac{1}{2m}(p' + mv)^2 = E' + p' \cdot v + \frac{mv^2}{2} \tag{2}$$

将式(2)代入式(1)中的前式，有

$$\begin{aligned}\psi_p(r,t) &= A e^{\frac{i}{\hbar}(p' \cdot r' - E't)} \exp\left[\frac{i}{\hbar} mv \cdot (r' + \frac{vt}{2})\right] \\ &= \psi'(r',t) \exp\left[\frac{i}{\hbar} mv \cdot (r' + \frac{vt}{2})\right] \\ &= \psi'_{p'}(r - vt, t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} mv \cdot r - \frac{1}{2} mv^2 t\right)\end{aligned} \tag{3}$$

式(3)是平面波之间的变换关系，由于任意波函数可以由平面波线性组合而成，故有普适变换关系

$$\psi(r,t) = \psi'(r - vt, t) \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(mv \cdot r - \frac{1}{2} mv^2 t\right)\right]$$

11.6 几个物理量的数量级估计

题 11.6 对于下列各量给出一个数量级的估计. (如果你知道答案，立刻写下. 如果需要计算，写明过程). (1) 典型核中一个核子的动能. (2) 氢原子的 Zeeman 分裂与基态结合能可相比较时的磁场(以 Gauss 为单位). (3) 对质量 $m = 1\mathrm{g}$，周期 $T = 1$，振幅 x_0=1cm 的经典谐振子波函数产生最大贡献的谐振子能量本征态的占有数 n. (4) 超精细结构分裂与原子氢 1s 态结合能的比. 将结果用精细结构常数 α，电子质量 m_e 和质子质量 m_p 表示.

解 (1) $T = \frac{p^2}{2m}$，用 Δp 估计 p

$$\Delta x \Delta p \sim \hbar, \qquad \Delta x \sim 10^{-13}\mathrm{cm}$$

所以

$$T \sim \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{\Delta x}\right)^2 \sim 10^7 \mathrm{eV}$$

(2) $\Delta E \sim \mu_B B$，而氢原子的 Coulomb 结合能为 $13.6\mathrm{eV}$.

所以

$$B \sim \frac{13.6\mathrm{eV}}{9.273 \times 10^{-21}\mathrm{erg}} \mathrm{Gs} \sim 10^9 \mathrm{Gs}$$

(3) 经典一维振子能量为

$$E=\frac{m}{2}(\omega x_0)^2=\frac{2\pi^2 m x_0^{\ 2}}{T^2}=2\pi^2\text{erg}$$

$$n\hbar\omega=2\pi^2\text{erg}$$

$$n=\frac{2\pi^2}{\hbar\omega}\text{erg}=\frac{\pi T\text{erg}}{\hbar}\simeq 3\times 10^{27}$$

(4) 氢原子基态的超精细结构能移为

$$\Delta E\sim\frac{m_e^2\alpha^4}{m_{\text{p}}}\qquad\text{(自然单位制)}$$

Coulomb 能为

$$E_e=\frac{m_e\alpha^2}{2}\qquad\text{(自然单位制)}$$

所以

$$\frac{\Delta E}{E}=\frac{\alpha^2}{2}\cdot\frac{m_e}{m_{\text{p}}}$$

11.7　一些物理概念(1)

题 11.7　(1) 如果L_z不随时间变化，那么对于 Hamilton 量可以说些什么？(2) 叙述散射理论中的光学定理. (3) 为什么在第一级Born近似时光学定理不被满足？(4) 解释为何质子不能有电四极矩. (5) 当一粒子在一弱的短程吸引势上散射时，相移的符号是什么？证明你的答案.

解　(1) 若L_z不随时间变化，则$[H,L_z]=0$. 即在球坐标中H不显含φ，也即H绕z轴旋转对称(但H可显含$\partial/\partial\varphi$)

(2) 光学定理为

$$\sigma_{\text{t}}=\frac{4\pi}{k}\text{Im}\,f(0)$$

式中σ_{t}为总截面. $f(0)$为弹性向前散射的散射振幅.

(3) 在一级 Born 近似中，当$V(r)$是实数时(大多如此)，给出的$f(\theta)$是实数而$f(\theta)$的虚部要在更高级的近似中才能出现. 所以光学定理在一级 Born 近似中不被满足.

(4) 由电四极矩的定义和球谐函数的性质，我们可知自旋$S<1$的粒子不可能具有电四极矩. 质子自旋为$1/2$自然没有电四极矩.

(5) 我们知道

$$\delta_l=-\frac{2\mu k}{\hbar^2}\int_0^\infty V(r)\,j_l^2(kr)\,r^2\text{d}r$$

当$V<0$为引力时，$\delta_l>0$.

11.8　一些物理概念(2)

题 11.8　简要地回答下列问题，如有可能，定量说明给出你的理由. (1) 一中性原子束通过一 Stern-Gerlach 仪器后，可观察到五条等间隔的谱线. 试问该原子的总角动量为多

少？(2) 试问处于 $^3p_0$ 态的原子的磁矩为多大(忽略核影响)？(3) 为什么稀有气体化学性质不活泼？(4) 以 $\mathrm{erg/cm^3}$ 作单位估计房间内(气温为300K)黑体辐射的能量密度. 假定墙壁为黑体. (5) 在氢气放电时，对应于 $2\,^2p_{1/2}\to 1\,^2s_{1/2}$ 和 $2\,^2p_{3/2}\to 1\,^2s_{1/2}$ 跃迁的两条谱线都被观察到了. 试估计两者的强度之比. (6) 是什么原因造成了在氦原子中存在着两套相互独立的光谱项能级图，即单态和三重态体系.

解 (1) 总角动量为 J 的中性原子(非极化)经过 Stern-Gerlach 仪器后由原来的一束分成 $2J+1$ 束可知：$2J+1=5$，$J=2$.

(2) 对于处于 $^3p_0$ 态的原子，总角动量 $J=0$，故其磁矩也为零(忽略了核影响).

(3) 稀有气体分子是由那些具有满壳层结构的原子组成，这些原子很难失去或获得其他电子. 所以稀有气体在化学性质上不活泼.

(4) 由黑体辐射公式，能量密度

$$
\begin{aligned}
\mu &= \frac{4}{c}\sigma T^4 \\
&= \frac{4}{3\times10^8}\times5.7\times10^{-8}\times300^4\,\mathrm{J/m^3} \\
&= \frac{4}{3\times10^8}\times5.7\times10^{8}\times300^4\times\frac{10^7}{10^6}\,\mathrm{erg/cm^3} \\
&\approx 6\times10^{-5}\,\mathrm{erg/cm^3}, \qquad T\sim300\mathrm{K}
\end{aligned}
$$

(5)

$$
\frac{I\left(2^2P_{1/2}\to1^2S_{1/2}\right)}{I\left(2^2P_{3/2}\to1^2S_{1/2}\right)}\approx\frac{2J_1+1}{2J_2+1}=\frac{2\times1/2+1}{2\times3/2+1}=\frac{1}{2}
$$

(6) 这是由于氦原子中两个电子的自旋(皆为 $1/2$)相互耦合形成总自旋 S 其值有 1(三重态)和 0(单态). 由于受跃迁选择规则 $\Delta S=0$ 限制，从而形成了单态和三重态两套相互独立的光谱项能级图.

11.9 W. K. B. 近似条件及电场中基态能量的减少

题 11.9 (1) 对于一维时间无关 Schrödinger 方程，推导 W. K. B. 近似的适用条件，并证明这个近似在经典转折点附近失效. (2) 用微扰论解释为什么处于外电场中的原子基态能量总是减小.

解 (1) Schrödinger 方程为

$$
\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\right]\psi(x)=E\psi(x)
$$

令

$$
\psi(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}s(x)/\hbar}
$$

$$
\frac{1}{2m}\left(\frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}x}\right)^2+\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\cdot\frac{1}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2s}{\mathrm{d}x^2}=E-V(x) \tag{1}
$$

令

$$s = s_0 + \frac{\hbar}{\mathrm{i}} s_1 + \left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\right)^2 s_2 + \cdots$$

代入式(1)得

$$\frac{1}{2m} s_0'^2 + \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \cdot \frac{1}{2m}\left(s_0'' + 2s_0' s_1'\right) + \left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\right)^2 \left(s_1'^2 + 2s_0' s_2' + s_1''\right) + \cdots = E - V(x)$$

为了能逐项比较. 我们要求

$$\left|\hbar s_0''\right| \ll \left|s_0'^2\right| \tag{2}$$

$$\left|2\hbar s_0' s_1'\right| \ll \left|s_0'^2\right| \tag{3}$$

此时有

$$\frac{1}{2m} s_0'^2 = E - V(x) \tag{4}$$

$$2s_0' s_1' + s_0'' = 0$$

$$2s_0' s_2' + s_1'^2 + s_1'' = 0$$

$$\vdots$$

式(2)和式(3)就是有效性条件. 由式(4)可得

$$s_0(x) = \pm\int_p^a p\mathrm{d}x = \pm\int^x \sqrt{2m(E - V(x))}\mathrm{d}x$$

于是式(2)可写成

$$\left|\frac{\hbar}{p^2} \cdot \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x}\right| \ll 1 \tag{5}$$

$$\left|\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \cdot \frac{1}{p}\right| \ll 1 \quad \text{或} \quad \left|\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}x}\right| \ll 1$$

式中

$$\lambda = \frac{\hbar}{p} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(E - V(x))}}$$

在转折点附近$V(x) \sim E, p \to 0$，式(5)不可能成立. 因而 W.K.B.方法不能应用到经典转折点附近.

(2) 对于外电场中的原子，微扰 Hamilton 量为

$$H' = e\varepsilon z$$

其中假设外电场强为ε，沿z轴，$z = \sum z_i$为所有电子的z坐标之和.

$$\Delta E_0 = H_{00}' + \sum_{n \neq 0} \frac{\left|H_{0n}'\right|^2}{E_0 - E_n}$$

由于z是一个奇算子，而基态宇称确定，所以

$$H_{00}' = 0$$

而$E_0 - E_n < 0$，所以$\Delta E_0 < 0$即基态能量减小.

11.10 球对称吸引势场中S态的W. K. B. 本征值条件问题

题 11.10 一个质量为m的粒子以零角动量在一个球对称吸引势场$V(r)$中运动. (1) 写出径向运动的微分方程，仔细定义径向波函数，并对束缚态确定它的边界条件. 在这个势中的S态的W. K. B. 本征值条件是什么（注意在一维W. K. B. 分析中径向运动$0<r<\infty$的限制）? (2) 对$V(r)=-V_0\exp(r/a)$，用W.K.B.关系去估计V_0的最小值，使得有且仅有一个束缚态. 把你的结果与指数势的精确结果$\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}=1.44$作一比较.

解 (1) 粒子的波函数可以写为径向部分与角向部分之积

$$\psi(\boldsymbol{r})=R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

其中径向波函数$R(r)$满足方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{1}{r^2}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)+V(r)\right]R(r)=ER(r),\qquad l=0$$

束缚态的边界条件为$rR(r)$在$r\to0$时趋于0，在$r\to\infty$时，$R(r)\to0$.

以$\chi(r)=R(r)/r$代换，则得出一维方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}r^2}+V(r)\chi=E\chi,\qquad 0<r<\infty$$

$$\chi(r)\xrightarrow{r\to0}0$$

于是，问题化为在“半”势$V(r)$中粒子的一维运动. 本征值的W.K.B.条件为(S态)

$$\oint\sqrt{2m(E-V)}\mathrm{d}r=\left(n+\frac{3}{4}\right)h,\qquad n=0,1,2,\cdots.$$

(2) 以$V(r)=-V_0\exp(r/a)$代入(1)中给出的回路积分方程，得到

$$\int_0^{a\ln\frac{V_0}{|E|}}\sqrt{2m\left[E+V_0\exp\left(-\frac{r}{a}\right)\right]}\,\mathrm{d}r=\frac{1}{2}\left(n+\frac{3}{4}\right)h$$

即

$$\sqrt{2m|E|}\int_0^{a\ln\frac{V_0}{|E|}}\sqrt{\frac{V_0}{|E|}\exp\left(-\frac{r}{a}\right)-1}\,\mathrm{d}r=\frac{1}{2}\left(n+\frac{3}{4}\right)h$$

下面来估算这个积分.

注意到V_0总应该取有限的值，而$|E|$在势$V(r)$中有且仅有一个束缚态时可以趋于0，于是

$$\sqrt{2m|E|}\int_0^{a\ln\frac{V_0}{|E|}}\sqrt{\frac{V_0}{|E|}-\exp\left(-\frac{r}{a}\right)-1}\,\mathrm{d}r\approx\sqrt{2mV_0}=\sqrt{2mV_0}\,2a\left(1-\sqrt{\frac{|E|}{V_0}}\right)$$

$$E=-\left(1-\frac{\left(n+\frac{3}{4}\right)\pi\hbar}{2a\sqrt{2mV_0}}\right)^2V_0$$

为了符合题中要求，我们需要

$$\frac{\frac{3}{4}\pi\hbar}{2a\sqrt{2mV_0}} \leqslant 1 < \frac{\frac{7}{4}\pi\hbar}{2a\sqrt{2mV_0}}$$

满足上式的V_0最小值为

$$\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} = \frac{9\pi^2}{64} \approx 1.39$$

可见它与精确解很相近.

11.11 热平衡时，处于分子某振动能级与转动能级的概率比

题 11.11 建立相关的方程(其中所有未知参数要作估计). HCl 分子键(弹性系数)约为 470N/m. 转动惯量为$2.3\times10^{-47}\text{kg}\cdot\text{m}^2$. (1) 在300K时，分子处于第一振动激发态的概率是多少? (2) 在所有处于振动基态的分子中，处于转动基态的分子数同处于转动第一激发态的分子数之比是多少?

解 (1)

$$H_0 = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2x^2$$

$$E_v^{(n)} = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \qquad \omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

所以

$$P_1 = \frac{e^{-x}}{1+e^{-x}+e^{-2x}+\cdots} = e^{-x}(1-e^{-x}), \qquad x = \frac{\hbar\omega}{kT}$$

式中

$$x = \frac{\hbar\omega}{kT} = \frac{1.054\times10^{-34}\times\left(\frac{470}{1.67\times10^{-27}}\right)^{1/2}}{1.38\times10^{-23}\times300} \approx 13.5$$

所以

$$p_1 \approx e^{-13.5} = 1.37\times10^{-6}$$

(2)

$$H_r = \frac{1}{2I}J^2$$

$$E_r^{(J)} = \frac{\hbar^2}{2I}J(J+1), \qquad J = 0,1,2,\cdots$$

所以

$$\frac{N(J=0)}{N(J=1)} = \exp\left(\frac{\hbar^2}{IkT}\right)\times\frac{1}{3}$$

式中$\frac{1}{3}$因子是考虑到$J=1$的转动能级有三重简并. 由于

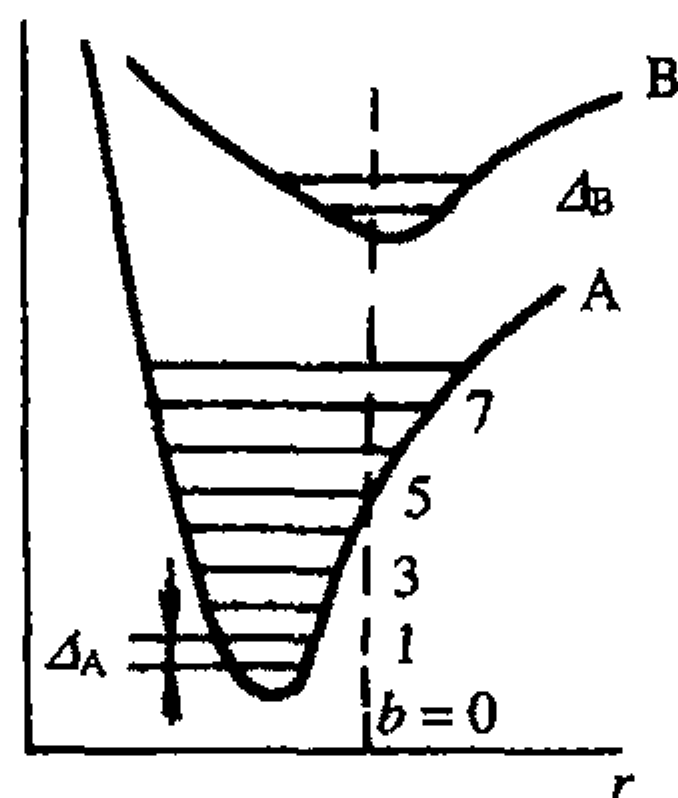
$$\frac{\left(\frac{\hbar^2}{I}\right)}{kT} \approx \frac{\left(\frac{(1.05\times10^{-34})^2}{2.3\times10^{-47}}\right)}{(1.38\times10^{-23}\times300)} \approx 0.12$$

所以

$$\frac{N(J=0)}{N(J=1)} = \frac{e^{0.12}}{3} = 0.38$$

11.12 双原子分子的电子态能级之间的跃迁

题 11.12 双原子分子电子基态 A 和一激发态 B 的势能如题图 11.2 所示. 每个电子态都有一系列的振动能级，它们用量子数 ν 表达. (1) 电子态 A，B 的两最低振动能级差分别由 Δ_A 和 Δ_B 表示. Δ_A 比 Δ_B 大还是小？为什么？(2) 一些分子最初在电子态 B 的最低振动能级通过自发跃迁到电子态 A. 在这些跃迁中，电子态 A 的哪些振动能级最易被占据？解释你的理由.



题图 11.2

解 (1) 因

$$k = \left.\left(\frac{\partial^2 V(x)}{\partial r^2}\right)\right|_{r=r_0}$$

r_0 为平衡位置. 从题图中很易得出 $k_A > k_B$

$$\Delta_A \approx \hbar\sqrt{\frac{k_A}{m}}, \qquad \Delta_B \approx \hbar\sqrt{\frac{k_B}{m}}$$

所以

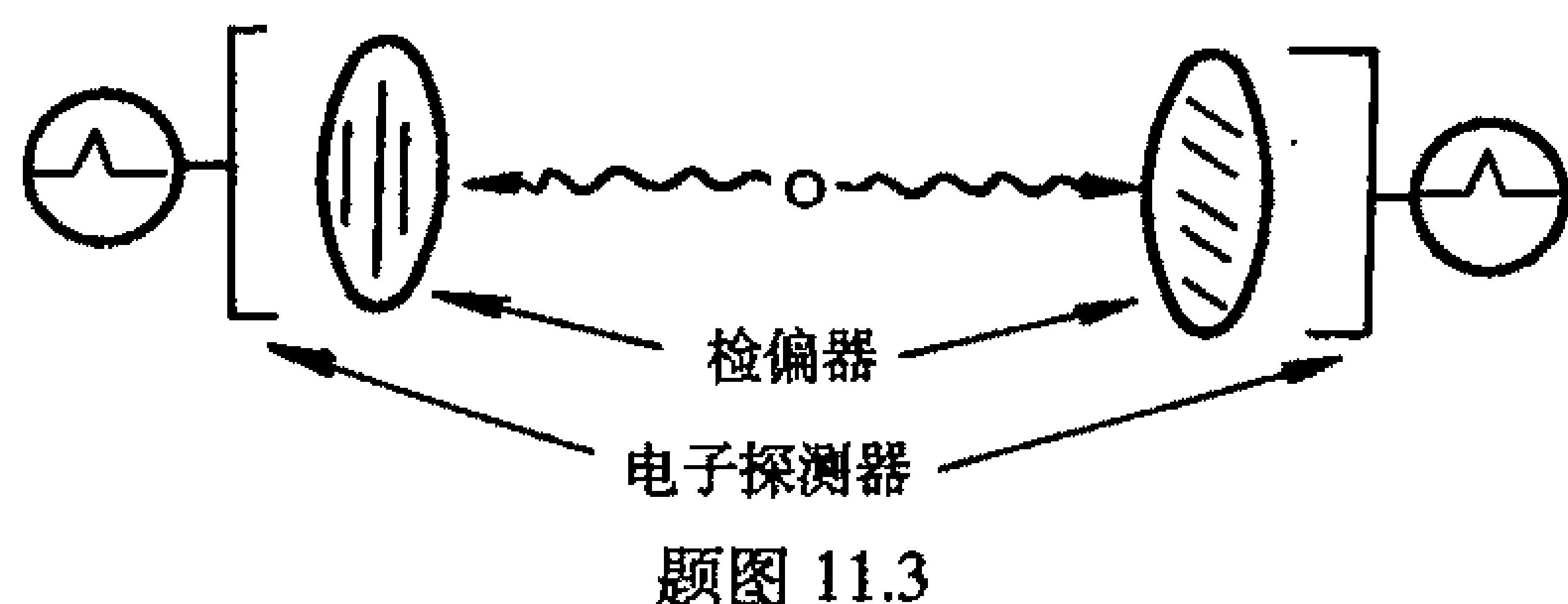
$$\Delta_A > \Delta_B$$

(2) 由于电子运动速度远比原子核的振动速度大，因此当电子从一个状态跃迁到另一个状态时，原子核间距离 r 几乎不发生变化，所以电子向各态跃迁的概率取决于电子在初态波的分布概率. 本题电子在 B 态的振动能级的基态. 电子位于平衡点 $r = r_{0B}$ 的概率大，从题图可以看出，电子态 A 的 $\nu = 5$ 的振动能级最易被占据.

11.13 正负电子偶素的单态衰变成两个光子通过检偏器的概率问题

题 11.13 正负电子偶素的单态衰变成两个光子，他们的偏振方向互相垂直. 如题图 11.3 所示安排实验，检偏器位于光子控测器之前，每个检偏器具有确定的透光方向，且两个检偏器的透光方向互相垂直，而偏振方向与检偏器透光方向相垂直的偏振光将完全被该检偏器所吸收. 当观察了许多事件后，两个探测器均有记录的事件数目与仅有一个探测器有记录的事件数目之比是多少？

解 设电子偶素静止，则衰变的两个光子的方向完全相反. 从而可知，一个光子到达一个偏振片. 另一个光子一定到达另一个偏振片. 再设探测器所张立体角 Ω 较小，那么到偏振片的光，其方向几乎全部垂直于偏振片. 因此，可以认为光的偏振方向全平行于偏振片.



题图 11.3

从题设条件容易得出，两偏振光的偏振方向分别与对应的检偏器的透光方向之间的夹角是相同的. 设夹角为θ，则两个光子能够通过对应检偏器的概率均是$\cos^2\theta$. 于是，仅有一个探测器有记录的概率为

$$P_1=\eta\times 2\times\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\cos^2\theta(1-\cos^2\theta)\mathrm{d}\theta\simeq\frac{\eta}{4}$$

式中$\eta=\dfrac{\Omega}{4\pi}$. 两探测器均有记录的概率为

$$P_2=\frac{\eta}{2\pi}\int_0^{2\pi}\cos^2\theta\cos^2\theta\mathrm{d}\theta=\frac{3\eta}{8}$$

所以，大量事件后

$$\rho=\frac{N_{双}}{N_{单}}=\frac{P_2}{P_1}\approx\frac{3}{2}$$

11.14 对点光源的光子探察器的计数率与符合计数率

题 11.14 一点光源Q，各向同性地向空间发出频率为ω及$\omega+\Delta\omega$的相干光束，每一频率的发射功率均为I(J/s). 两个感光面积均为s，并有能对单个光子作出反应的探测器A和B，分别放在距离点源Q为l_A及l_B的地方，如题图 11.4 所示. 在以下的计算中，假定，$\Delta\omega/\omega\ll1$，且此实验在真空中进行. (1)计算A，B上的单个光子的计数率(光子/秒)(表示成时间的函数). 假定时间尺度远大于$1/\omega$. (2) 如果现将A，B发出的脉冲输入一符合线路(分辨时间为τ). 问符合计数率的时间平均值是多少? 假定$\tau\ll1/\Delta\omega$，并记住，如果两个输入脉冲在时间间隔τ内到达，符合电路将产生一输出脉冲.

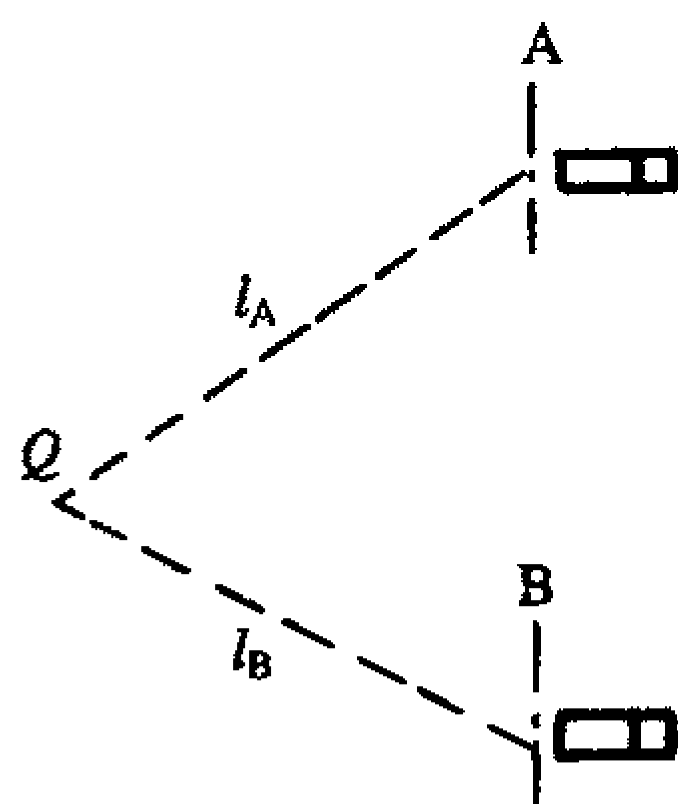


图 11.4

解 (1) 在A处，光子的波函数为(略去$\Delta\omega/\omega$小量)

$$\psi_A(l_A,t)=c_1\left[e^{i\omega_1(l_A/c-t)}+e^{i\omega_2(l_A/c-t)}\right]$$

发现光子的概率为(单位时间)

$$P_A=|\psi|^2=|c_1|^2\left[1+1+2\cos\Delta\omega\left(\frac{l_A}{c-t}\right)\right]$$

$$=2|c_1|^2\left[1+\cos\Delta\omega\left(\frac{l_A}{c-t}\right)\right]$$

$$=4|c_1|^2\cos^2\frac{\Delta\omega}{2}\left(\frac{l_A}{c-t}\right)$$

若只有单个频率时，$P_A=|c_1|^2$，那么此时单位时间的光子计数率应该为$\dfrac{I/\hbar\omega}{4\pi l_A^2}s$

所以有

$$|c_1|^2=\frac{Is}{4\pi l_A{}^2\hbar\omega}$$

$$P_A=\frac{Is}{\pi l_A^2\hbar\omega}\cos^2\frac{\Delta\omega}{2}\left(\frac{l_A}{c-t}\right)$$

同理

$$P_B=\frac{Is}{\pi l_B{}^2\hbar\omega}\cos^2\frac{\Delta\omega}{2}\left(\frac{l_B}{c-t}\right)$$

$$=4|c_2|^2\cos^2\frac{\Delta\omega}{2}\left(\frac{l_B}{c-t}\right)$$

(2) 将P_A，P_B输入符合线路，符合线路脉冲输出率为(取时间平均)

$$P=\lim_{T\to\infty}\frac{1}{2T}\int_{-T}^{T}\mathrm{d}t\int_{-\tau}^{\tau}P_A(t)P_B(t+x)\mathrm{d}x$$

$$=\lim_{T\to\infty}\frac{1}{2T}\int_{-T}^{T}\mathrm{d}t\int_{-\tau}^{\tau}4c^4\left[1+\cos\Delta\omega\left(\frac{l_A}{c-t}\right)\right]\cdot\left[1+\cos\Delta\omega\left(\frac{l_B}{c}-t-x\right)\right]\mathrm{d}x$$

$$=\lim_{T\to\infty}\frac{1}{2T}\int_{-T}^{T}\mathrm{d}t4c^4\cdot\left[1+\cos\left(\frac{l_A}{c-t}\right)\Delta\omega\right]\left[2\tau+2\tau\cos\Delta\omega\left(\frac{l_B}{c}-t\right)\right]$$

其中已令

$$c^4=\frac{I^2s^2}{16\pi^2l_B{}^2l_A{}^2\hbar^2\omega^2}=|c_1|^2|c_2|^2$$

并且用到$3\tau\cdot\Delta\omega\ll1$，从而有

$$\int_{-T}^{\tau}\cos\Delta\omega\left(\frac{l_B}{c-t-x}\right)\mathrm{d}x=2\tau\cos\Delta\omega\left(\frac{l_B}{c}-t\right)$$

所以

$$P=\lim_{T\to\infty}\frac{1}{2T}\int_{-T}^{T}4c^4\left[1+\cos\left(\frac{l_A}{c-t}\right)\Delta\omega\right]\left[1+\cos\Delta\omega\left(\frac{l_B}{c}-t\right)\right]2\tau\mathrm{d}t$$

$$=\lim_{T\to\infty}\frac{1}{2T}\int_{-T}^{T}\mathrm{d}t4c^4\cdot2\tau\left[1+\cos\Delta\omega\left(\frac{l_B}{c}-t\right)+\cos\left(\frac{l_A}{c}-t\right)\Delta\omega\right.$$

$$\left.+\cos\left(\frac{l_A}{c}-t\right)\Delta\omega\cos\left(\frac{l_B}{c}-t\right)\right]\cdot\Delta\omega$$

$$=\lim_{T\to\infty}\frac{1}{2T}\cdot4c^4\cdot2\tau\left[2T+\frac{2T}{2}\cos\frac{l_A-l_B}{c}\cdot\Delta\omega\right]$$

$$=8\tau c^4\left[1+\frac{1}{2}\cos\frac{\Delta\omega(l_A-l_B)}{c}\right]$$

$$=8\tau\cdot\frac{I^2s^2}{16\pi^2l_B^2l_A^2\hbar^2\omega^2}\left[1+\frac{1}{2}\cos\frac{\Delta\omega}{c}(l_A-l_B)\right]$$

$$=\frac{\tau l^2 s^2}{2\pi^2 l_B^2 l_A^2 \hbar^2 \omega^2}\left[1+\frac{1}{2}\cos\frac{\Delta\omega}{c}(l_A-l_B)\right]$$

11.15 近经典体系的能级

题 11.15 一个带电的近经典体系由于辐射失去能量. 在能量为 E 时它以频率 $\nu(E)=\alpha(E/E_0)^{-\beta}$ 辐射(及振动)，这里 α、β 和 E_0 为正的常数. 计算体系的量子能级 E_n，$n\gg 1$.

解 对于 $n\gg 1$，Bohr 对应原理有效

$$h\nu=\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}n}=h\alpha(E/E_0)^{-\beta}$$

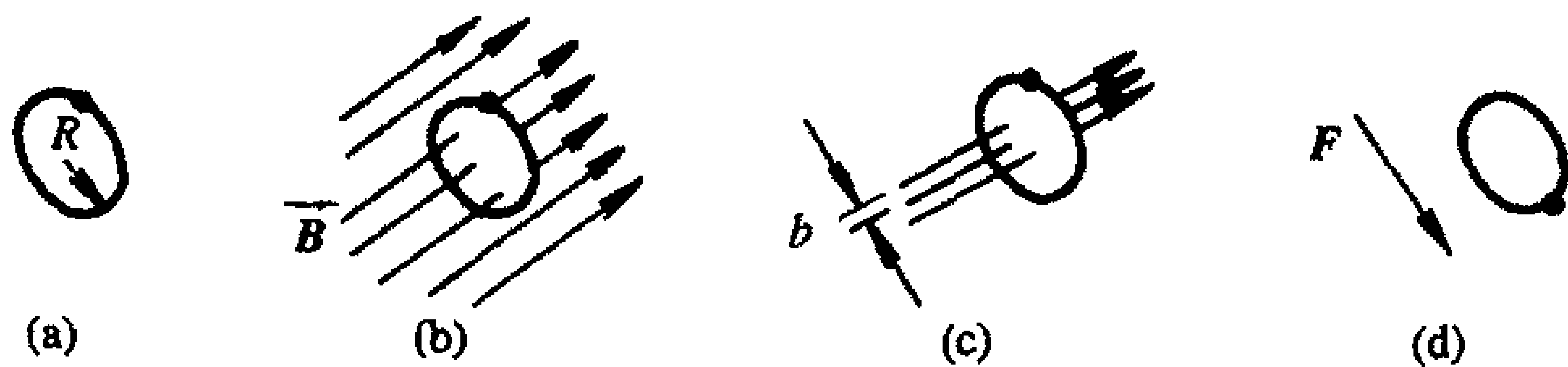
$$E^{\beta}\mathrm{d}E=h\alpha E_0^{\ \beta}\mathrm{d}n$$

由此得

$$E_n=\left[h\alpha(\beta+1)nE_0^{\ \beta}\right]^{\frac{1}{1+\beta}}$$

11.16 做圆周运动的无自旋带电粒子的能级

题 11.16 一个无自旋粒子(质量为 m，带电为 q)被束缚在一半径为 R 的圆周上运动. 对以下每种情况(题图 11.6)分别求其允许的能级(可以有一个公共的附加常数). (1) 粒子的运动是非相对论的；(2) 在与圆面垂直的方向上有一均匀的磁场 B；(3) 同样的磁通穿过圆面，但是它现在被包在一半径为 $b(b>R)$ 的螺线管中；(4) 在圆面内有一极强的电场 F 存在 $\left(q|F|\gg \hbar^2/\left(mR^2\right)\right)$；(5) 没有 F 及 B，但粒子的运动是极端相对论的；(6) 圆现在被一等周长但只有一半面积的椭圆所代替.



题图 11.6

解 (1) 此时 Hamilton 量为 $H=\frac{p_\theta^{\ 2}}{2m}=\frac{-\hbar^2}{2MR^2}\cdot\frac{\partial^2}{2\theta^2}$ 由本征方程可解出本征态为

$$\psi_n(\theta)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{in\theta}$$

相应的能量本征值为

$$E=\frac{p^2}{2m}=\frac{1}{2m}\left(\frac{n\hbar}{R}\right)^2=\frac{\hbar^2}{2mR^2}n^2,\qquad n=0,\pm1,\pm2,\cdots$$

(2) 此时的 Hamilton 量为

$$H=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{P}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right),\qquad \boldsymbol{A}=\frac{1}{2}Br\cdot\boldsymbol{e}_\theta$$

本征方程为

$$\frac{1}{2m}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{1}{R}\cdot\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{q}{c}\cdot\frac{1}{2}BR\right)^2\psi(\theta)=E\psi(\theta)$$

其解为$\psi(\theta)=c\mathrm{e}^{\mathrm{i}n\theta}$.为使$\psi(\theta)=\psi(\theta+2\pi)$，要求$n=0,\ \pm1,\pm2,\cdots$.代入方程得

$$E=\frac{1}{2m}\left(\frac{n\hbar}{R}-\frac{q}{2c}BR\right)^2$$

(3) 因为磁通ϕ与(2) 的情形相同，所以能级不变.

(4) Hamilton 量为

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{1}{R^2}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\theta^2}+(-qFR\cos\theta)$$

因电场F很大，粒子处在$\theta\sim0°$附近的概率大，因此可以把$\cos\theta$展开

$$\cos\theta=1-\frac{1}{2}\theta^2+O(\theta^4)$$

舍去$O(\theta^4)$项，得到如下的H量

$$H=-\frac{\hbar^2}{2mR^2}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\theta^2}-qFR\left(1-\frac{1}{2}\theta^2\right)$$

$$H+qFR=-\frac{\hbar^2}{2mR^2}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\theta^2}+\frac{1}{2}qFR\theta^2$$

这是一个我们所熟知的谐振子的 Hamilton 函数. 如果我们作如下规定

$$M=mR^2,\qquad M\omega^2=qFR$$

得

$$H+qFR=-\frac{\hbar^2}{2M}\cdot\frac{d^2}{d\theta^2}+\frac{1}{2}M\omega^2\theta^2$$

因而有

$$E_n+qFR=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega-qFR$$

式中

$$\omega=\sqrt{\frac{qFR}{M}}=\sqrt{\frac{qFR}{mR^2}}=\sqrt{\frac{qF}{mR}}$$

因而

$$E_n=-qFR+\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\sqrt{\frac{qF}{mR}}$$

(5) 由于动量很大，可用 W. K. B. 近似，或者由量子化条件

$$p\cdot2\pi R=nh,\qquad p=n\hbar/R$$

则极端相对论情况

$$E = pc = n\hbar/R\cdot c, \qquad n = 0,1,2,\cdots$$

(6) 我们还是利用量子化条件

$$p\cdot 2\pi R = n\hbar, \qquad p = n\hbar/R$$

所以$E = pc = n\hbar/R\cdot c$，与(5)同样.

11.17 粒子被晶格散射的非相消散射条件

题 11.17 考虑一个粒子被由基矢 $\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{b}$、$\boldsymbol{c}$ 组成的规则晶格散射，它与晶格的相互作用表示为

$$V = \sum_i V(|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i|)$$

其中$V(|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i|)$是每个原子的势，它对于这个原子的格点是球对称的. 利用 Born 近似证明非相消散射的条件是 Bragg 定律被满足.

证明 Born 近似给出

$$f(\theta) = -\frac{m}{4\pi\hbar^2}\sum_j\int e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0)\cdot\boldsymbol{r}'}V(|\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}_j|)d\boldsymbol{r}'$$
$$= -\frac{m}{4\pi\hbar^2}\sum_j e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0)\cdot\boldsymbol{r}_j}\int e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0)\cdot\boldsymbol{r}'}V|\boldsymbol{r}'|d\boldsymbol{r}'$$

由此，我们只需考虑求和项

$$\sum_j e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0)\cdot\boldsymbol{r}_j}$$

由于求和遍及所有格点，要使它不为零，仅有

$$\boldsymbol{r}_j\cdot(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0) = 2n\pi$$

才行. 于是，非相消散射的条件为

$$\boldsymbol{r}_j\cdot(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0) = 2\pi n\,, \qquad \text{对一切格矢 } \boldsymbol{r}_j$$

由此得

$$\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0) = 2\pi l_1$$
$$\boldsymbol{b}\cdot(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0) = 2\pi l_2$$
$$\boldsymbol{c}\cdot(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0) = 2\pi l_3$$

这就是 Bragg 定律.

11.18 在变分法中用线性组合波函数作为试探波函数求基态波函数等问题

题 11.18 为求 Hamilton 量 H 的近似本征函数，我们可在变分法中用具有形式$\psi = \sum_{k=1}^{n} a_k\phi_k$ 的试探波函数，式中ϕ_k是给定函数，a_k是可变参数. 证明能得到 n 个解ψ_α，具有能量$\varepsilon_\alpha = \langle\psi_\alpha|H|\psi_\alpha\rangle/\langle\psi_\alpha|\psi_\alpha\rangle$，其中 H 为 Hamilton 量. 我们将这些能量排起来，使得$\varepsilon_1 \leqslant \varepsilon_2 \leqslant \varepsilon_3\cdots$. 从 Hamilton 量的 Hermite 性证明，ψ_α或者自动地或者可被选择成具有性质$\langle\psi_\alpha|\psi_\beta\rangle = \delta_{\alpha\beta}$，$\langle\psi_\alpha|H|\psi_\beta\rangle = \varepsilon_\alpha\delta_{\alpha\beta}$. 肯定能找到$\psi_1$和$\psi_2$(它与$\psi_1$正交)的一个线性组合，以

构成 H 的精确的基态，使其对应的本征值为 E_1. 根据这一事实，证明 $\varepsilon_2 \geqslant E_2$，这里 E_2 是第一激发态的精确能量.

解　$\{\phi_k\}$ 是一组线性无关的函数，不妨假定 $\langle\phi_i|\phi_j\rangle = \delta_{ij}$ (至多作一次相应于 Schmidt 正交化步骤的线性变换即可). 于是

$$\bar{H} = \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{\sum\limits_{ij}^{n} a_i^* a_j \lambda_{ij}}{\sum\limits_{ij}^{n} a_i^* a_t} \equiv \sum_{ij} x_i^* \lambda_{ij} x_j = x + \hat{\lambda} x$$

式中 $x_i = \dfrac{a_i}{\sqrt{\sum_j |a_j|^2}}$，　$\lambda_{ij} = \langle\phi_i|H|\phi_j\rangle = \lambda_{ji}^*$，诸 x_i 之间满足约束 $\sum\limits_{i=1}^{n}|x_i|^2 = 1$.

由于 $\hat{\lambda}$ 的 Hermite 性，作适当的旋转变换 $X = \hat{p}Y$，可要求 $\hat{\Lambda} = \hat{p} + \hat{\lambda}\hat{p} = \hat{p}^{-1}\hat{\lambda}\hat{p}$ 是对角阵，且对角元满足 $\Lambda_{11} \leqslant \Lambda_{22} \leqslant \Lambda_{33} \cdots$，于是

$$\bar{H} = \sum_{i=1}^{n} \Lambda_{ii} |y_i|^2$$

式中 y_i 满足

$$\sum_{i=1}^{n} |y_i|^2 = 1$$

根据变分原理，得

$$0 = \delta\left\{\bar{H} - \alpha\left[\sum_i |y_i|^2 - 1\right]\right\} = \delta\left\{\sum_i (\Lambda_{ii} - \alpha)|y_i|^2 + \alpha\right\}$$

式中有 $\sum\limits_i (\Lambda_{ii} - \alpha)|y_i|\delta|y_i| = 0$，$\alpha$ 是 Lagrange 乘子. 于是

$$(\Lambda_{ii} - \alpha)|y_i| = 0, \qquad i = 1, 2, \cdots, n$$

或者 $\alpha = \Lambda_{ii}$，或者 $|y_i| = 0$. 故变分方程的 n 组解为

$$\alpha = \Lambda_{ii}, \qquad y_i^{(i)} = \delta_j^i = \delta_{ij}, \qquad i = 1, 2, \cdots, n$$

即我们得到 n 个解 ψ_α，其中第 α 个解 $y_i^{(\alpha)} = \delta_i^\alpha$ 具有能量

$$\varepsilon_\alpha = \frac{\langle\psi_\alpha | H | \psi_\alpha\rangle}{\langle\psi_\alpha | \psi_\alpha\rangle} = \sum_i \Lambda_{ii} \left|y_i^{(\alpha)}\right|^2 = \Lambda_{\alpha\alpha}$$

且 $\varepsilon_1 \leqslant \varepsilon_2 \leqslant \varepsilon_3 \leqslant \cdots$. 从我们所选的 $\psi_\alpha = \psi_\alpha[X(Y)]$，看出

$$\langle\psi_\alpha|\psi_\beta\rangle = \sum_i a_i^{(\alpha)*} a_i^{(\beta)} = \sqrt{\sum_j \left|a_j^{(\alpha)}\right|^2 \sum_j \left|a_i^{(\beta)}\right|^2} \sum_i \chi_i^{(\alpha)*} x_i^{(\beta)}$$

$$= \sqrt{\sum_j \left|a_j^{(\alpha)}\right|^2 \sum_j \left|a_j^{(\beta)}\right|^2} \sum_i y_i^{(\alpha)*} y_i^{(\beta)} = \left[\sum_j \left|a_j^{(\alpha)}\right|^2\right] \delta_{\alpha\beta}$$

$$\langle\psi_\alpha|H|\psi_\beta\rangle = \sum_{ij} a_i^{(\alpha)*} \lambda_{ij} a_j^{(\beta)} = \sqrt{\sum_j \left|a_j^{(\alpha)}\right|^2 \sum_j \left|a_j^{(\beta)}\right|^2} \sum_{ij} x_i^{(\alpha)*} \lambda_{ij} x_j^{(\beta)}$$

$$=\sqrt{\sum_j\left|a_j^{(\alpha)}\right|^2\sum_j\left|a_j^{(\beta)}\right|^2}\sum_{ij}y_i^{(\alpha)*}\Lambda_{ij}y_j^{(\beta)}$$

$$=\left[\sum_j\left|a_j^{(\alpha)}\right|^2\right]\varepsilon_\alpha\delta_{\alpha\beta}$$

所以，当选$\Psi_\alpha=\psi_\alpha\Big/\sqrt{\sum_j\left|a_j^{(\alpha)}\right|^2}$，便有

$$\langle\psi_\alpha|\psi_\beta\rangle=\delta_{\alpha\beta},\qquad\langle\psi_\alpha|H|\psi_\beta\rangle=\varepsilon_\alpha\delta_{\alpha\beta}$$

设H的基态波函数和第一激发态波函数为Φ_1和Φ_2，它们的精确能量分别为E_1和E_2，根据题设，一定有数μ_1和μ_2存在，使得

$$\Phi_1=\mu_1\Psi_1+\mu_2\Psi_2,\qquad|\mu_1|^2+|\mu_2|^2=1$$

同时，由Φ_1和Φ_2正交可知必有

$$\Phi_2=\mu_2^*\Psi_1-\mu_1^*\Psi_2$$

于是

$$E_1=\varepsilon_1|\mu_1|^2+\varepsilon_2|\mu_2|^2$$

$$E_2=\varepsilon_1|\mu_2|^2+\varepsilon_2|\mu_1|^2=(\varepsilon_1-\varepsilon_2)|\mu_2|^2+\varepsilon_2\leqslant\varepsilon_2$$

11.19 用变分法求基态能量

题 11.19 求出尝试波函数

$$\phi(x)=A\mathrm{e}^{-\lambda^2x^2},\qquad A\text{ 是归一化常数}$$

式中的参数λ之值，它可以给出单粒子 Hamilton 量

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+bx^4,\qquad b\text{ 是常数}$$

的基态能量的最好近似. 下列积分可能有用

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\alpha x^2}\mathrm{d}x=\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}},\qquad\int_{-\infty}^{\infty}\chi^2\mathrm{e}^{-\alpha x^2}\mathrm{d}x=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}},\qquad\int_{-\infty}^{\infty}\chi^4\mathrm{e}^{-\alpha x^2}\mathrm{d}x=\frac{3}{4}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^5}}$$

解 先求λ.

$$\int_{-\infty}^{\infty}\phi^*(x)\phi(x)\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{\infty}A^2\mathrm{e}^{-2\lambda^2x^2}\mathrm{d}x=A^2\sqrt{\frac{\pi}{2\lambda^2}}=1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\phi^*(x)H\phi(x)\mathrm{d}x$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}A^2\mathrm{e}^{-\lambda^2x^2}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+bx^4\right)\mathrm{e}^{-\lambda^2x^2}\mathrm{d}x$$

$$=A^2\int_{-\infty}^{\infty}\left[-\frac{\hbar^2}{m}(2\lambda^4x^2-\lambda^2)+bx^4\right]\mathrm{e}^{-2\lambda^2x^2}\mathrm{d}x$$

$$=A^2\left[-\frac{\hbar^2}{m}\left(2\lambda^4\cdot\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{(2\lambda^2)^3}}-\lambda^2\sqrt{\frac{\pi}{2\lambda^2}}\right)+b\sqrt{\frac{\pi}{(2\lambda^2)^5}}\frac{3}{4}\right]$$

$$=A^2\left[\frac{1}{2}\cdot\frac{\hbar^2}{m}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\lambda+b\sqrt{\frac{\pi}{2}}\cdot\frac{3}{16\lambda^5}\right]$$

令

$$\langle H\rangle=\frac{\int\phi^* H\phi\mathrm{d}x}{\int\phi^*\phi\mathrm{d}x}=\frac{1}{2}\left(\frac{\hbar^2}{m}\lambda^2+b\frac{3}{8\lambda^4}\right)$$

根据变分法，由 $\delta\langle H\rangle=0$, 可得

$$\lambda^6=\frac{3bm}{4\hbar^2}$$

代入上式，得

$$\langle H\rangle=\frac{3}{2}\left(\frac{\hbar^4}{4m^2}\cdot\frac{3b}{8}\right)^{\frac{1}{3}}$$

也可以根据不等式 $\frac{1}{3}(a+b+c)\geqslant(abc)^{\frac{1}{3}}$，可得

$$\langle H\rangle=\frac{1}{2}\left(\frac{\hbar^2\lambda^2}{2m}+\frac{\hbar^2\lambda^2}{2m}+\frac{3b}{8\lambda^4}\right)\geqslant\frac{3}{2}\left(\frac{\hbar^4}{4m^2}\cdot\frac{3b}{8}\right)^{\frac{1}{3}}$$

故基态能量在此尝试波函数下的最好近似为

$$\langle H\rangle_{\min}=\frac{3}{4}\left(\frac{3}{4}\right)^{\frac{1}{3}}\left(\frac{b\hbar^4}{m^2}\right)^{\frac{1}{3}}$$

11.20 用量纲分析推导能量本征值与参数的关系，用变分法求基态能量

题 11.20 考虑势 $V=g|x|$的能级. (1) 用量纲分析，推导一般本征值与参数的关系($m=$质量，$\hbar$，g)· (2) 用简单的尝试函数

$$\psi=c\theta(x+a)\theta(a-x)\left(1-\frac{|x|}{a}\right)$$

计算基态能量的变分估计 (这里 c，a 是变数，当 $x<0$，$\theta(x)=0$；当 $x>0$，$\theta(x)=1$). (3) 为什么 $\psi=c\theta(x+a)\theta(a-x)$ 不是一个好的尝试函数？(4) 简述(不是方程)你将如何得到第一激发态能量的变分估计.

解 (1) Schrödinger 方程为

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2}{\partial x^2}+g|x|\right)\psi(x)=E\psi(x)$$

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-g|x|)\right]\psi(x)=0$$

因为

$$\left[\frac{mE}{\hbar^2}\right]=L^{-2},\qquad \left[\frac{mg}{\hbar^2}\right]=L^{-3},\qquad \left[\left(\frac{mE}{\hbar^2}\right)^3\right]=\left[\left(\frac{mg}{\hbar^2}\right)^2\right]$$

所以

$$[E]=\left[\left(\frac{\hbar^2}{m}g^2\right)^{\frac{1}{3}}\right]$$

$$E_n=\left(\frac{\hbar^2}{m}g^2\right)^{\frac{1}{3}}f(n)$$

式中$f(n)$为正整数n的某一函数.

(2) 先尝试对波函数归一化

$$1=\int\psi^*(x)\psi(x)\mathrm{d}x=|c|^2\int\left[\theta(x+a)\theta(a-x)\left(1-\frac{|x|}{a}\right)\right]^2\mathrm{d}x$$

$$=|c|^2\int_{-a}^{a}\left(1-\frac{|x|}{a}\right)^2\mathrm{d}x=\frac{2a}{3}|c|^2$$

所以

$$|c|^2=\frac{3}{2a}$$

然后求 Hamilton 量 $H=-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+g|x|$ 的平均值

$$\bar{H}=\int\psi^*H\psi\mathrm{d}x=-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)\mathrm{d}x+g\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)|x|\psi(x)\mathrm{d}x$$

但是

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)|x|\psi(x)\mathrm{d}x=|c|^2\left[-\int_{-a}^{0}x\left(1+\frac{x}{a}\right)^2\mathrm{d}x+\int_{0}^{a}x\left(1-\frac{x}{a}\right)^2\mathrm{d}x\right]$$

$$=\frac{a^2|c|^2}{6}=\frac{a}{4}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi(x)=c\delta(x+a)\theta(a-x)\left(1-\frac{|x|}{a}\right)-c\theta(x+a)\delta(x-a)\left(1-\frac{|x|}{a}\right)$$

$$+c\theta(x+a)\theta(x-a)\left(-\frac{|x|}{x}\cdot\frac{1}{a}\right)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)\mathrm{d}x=\psi(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi(x)\Big|_{-\infty}^{\infty}-\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right)^2\mathrm{d}x$$

$$=-\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right)^2\mathrm{d}x=-|c|^2\int_{-a}^{a}\left(-\frac{|x|}{xa}\right)^2\mathrm{d}x$$

$$=-\frac{2|c|^2}{a}=-\frac{3}{a^2}$$

所以

$$\bar{H}=\frac{3\hbar^2}{2ma^2}+\frac{a}{4}g$$

$$\frac{\delta\bar{H}}{\delta a}=-\frac{3\hbar^2}{ma^3}+\frac{g}{4}=0$$

得

$$a=\left(\frac{12\hbar^2}{gm}\right)^{\frac{1}{3}}$$

$$\bar{H}=\frac{3\hbar^2}{2m}\left(\frac{gm}{12\hbar^2}\right)^{\frac{2}{3}}+\frac{g}{4}\left(\frac{12\hbar^2}{gm}\right)^{\frac{1}{3}}=\frac{3}{4}\left(\frac{3\hbar^2g^2}{2m}\right)^{\frac{1}{3}}$$

(3) 若取 $\psi=c\theta(x+a)\theta(a-x)$，则重复上述计算程序，得

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)|x|\psi\mathrm{d}x=a^2c^2$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi\frac{d^2}{dx^2}\psi\mathrm{d}x=0$$

$$1=\int_{-a}^{a}\psi^2\mathrm{d}x=2ac^2$$

$$\bar{H}=ga^2c^2=g\frac{a}{2}$$

$$\frac{\partial\bar{H}}{\partial a}=\frac{g}{2}\neq 0$$

显然没有极点，故所选波函数不好.

(4) 选择第一激发态的尝试波函数，要求它与基态尝试波函数正交，然后用与求基态能量变分估计相同的方法，求出第一激发态能量的变分估计.

11.21 用变分法求介子的基态能量

题 11.21(用非相对论方法解此问题) 多数介子可由夸克-反夸克束缚态($g\bar{g}$)描述. 考虑由 S 态的($g\bar{g}$)对构成介子的情形. 设 m_g 是夸克质量. 假定束缚 g 和 $\bar{g}$ 的势可写成 $V=\frac{A}{r}+Br$，$A<0, B>0$. 请用 A, B, m_g 和 $\hbar$ 对这个体系的基态能量给出一个合理的近似. 遗憾的是对于一类适合于该题解的尝试函数，需要解一个三次方程，假如这件事被你遇上了，不必花费你有限的时间去解三次方程，你可以用 $A=0$ 的情况(这并不减少得分)完成你的解. 请把最后答案写成一个数值常数乘以 B、m_g 和 $\hbar$ 的一个函数.

解法一 取尝试波函数为氢原子式基态波函数

$$\psi(r) = e^{-r/a}$$

$$\begin{aligned}\bar{H} &= \langle\psi|H|\psi\rangle / \langle\psi|\psi\rangle \\ &= \int_0^\infty dr r^2 e^{-r/a}\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{1}{r^2}\cdot\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + Ar^{-1} + Br\right]e^{-r/a} \Big/ \int_0^\infty dr r^2 e^{-2r/a} \\ &= \frac{3Ba}{2} + \frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{1}{a^2} + \frac{A}{a} \qquad (1)\end{aligned}$$

变分原理要求 $\frac{\delta\bar{H}}{\delta a} = 0$，所以有

$$\frac{3}{2}B - \frac{\hbar^2}{\mu}\cdot\frac{1}{a^3} - \frac{A}{a^2} = 0 \qquad (2)$$

即

$$\frac{3}{2}Ba^3 - Aa - \frac{\hbar^2}{\mu} = 0$$

取 $A = 0$ 可解得

$$a = \left(\frac{2\hbar^2}{3B\mu}\right)^{\frac{1}{3}}$$

代入式(1)可得基态能量

$$E_g = \bar{H} = \frac{3}{4}\left(\frac{36B^2\hbar^2}{m_g}\right)^{\frac{1}{3}} = 2.48\left(\frac{B^2\hbar^2}{m_g}\right)^{\frac{1}{3}}$$

注 式(2) 中 $\mu = \frac{m_g}{2}$ 为 $g\bar{g}$ 体系的约化质量.

解法二 此题基态能量也可用不确定性关系求得，准确到相差一个常系数

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{A}{r} + Br$$

由于 $p_x x > \frac{\hbar}{2}$(y，z 类似)，对基态无妨假定

$$p_x x = \frac{\hbar}{2}$$

于是

$$H = \frac{\hbar^2}{8\mu x^2} + \frac{\hbar^2}{8\mu y^2} + \frac{\hbar^2}{8\mu z^2} + \frac{A}{r} + Br$$

求极值 $\frac{\partial H}{\partial x} = 0$，得

$$\frac{-\hbar^2}{4\mu x^2} - \frac{Ax}{r^3} + \frac{Bx}{r} = 0$$

由 x，y，z 对称可知，达极值时 $x = y = z$，即 $r = \sqrt{3}x$. 于是可得方程

$$-\frac{\hbar^2}{4\mu x^3}-\frac{A}{3\sqrt{3}x^2}+\frac{B}{\sqrt{3}}=0$$

令 $A=0$，可得

$$x=3^{\frac{1}{6}}\left(\frac{\hbar^2}{4\mu B}\right)^{\frac{1}{3}},\qquad r=\left(\frac{9\hbar^2}{4\mu B}\right)^{\frac{1}{3}}$$

代入 H 中得

$$\bar{H}=\frac{3\hbar^2}{8\mu x^2}+Br=2\left(\frac{9}{4}\cdot\frac{\hbar^2B^2}{\mu}\right)^{\frac{1}{3}}=2\left(\frac{9}{2}\cdot\frac{\hbar^2B^2}{m_q}\right)^{\frac{1}{3}}=3.30\left(\frac{\hbar^2B^2}{m_q}\right)^{\frac{1}{3}}$$

11.22　以氢原子波函数为尝试波函数，用变分法求 $V(r)=-g^2/r^{3/2}$ 时的基态能量上限

题 11.22　一个粒子在吸引势 $V(r)=-g^2/r^{3/2}$ 中运动. 运用变分原理求出其 S 态最低能量的一个上限. 用类氢原子波函数作为你的试探波函数.

解　取试探波函数为 $\psi(r)=\left(\frac{k^3}{8\pi}\right)^{1/2}\mathrm{e}^{-kr/2}$（此波函数为 S 态，且已归一）. 对于 S 态

$$\begin{aligned}\bar{H}(k)&=\int\psi^*H\psi\mathrm{d}\tau\Big|_{l=0}\\&=\int\psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\cdot\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}+V(r)\right)\psi\mathrm{d}\tau\\&=\int_0^\infty\left(\frac{k^3}{8\pi}\right)^{1/2}\mathrm{e}^{-kr/2}\left[-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\cdot\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{-g^2}{r^{3/2}}\right]\left(\frac{k^3}{8\pi}\right)^{1/2}\mathrm{e}^{-kr/2}\cdot4\pi r^2\mathrm{d}r\\&=\frac{k^3}{8\pi}\cdot4\pi\int_0^{+\infty}\mathrm{d}rr^2\mathrm{e}^{-kr/2}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{1}{r^2}\cdot\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)-\frac{g^2}{r^{3/2}}\right]\mathrm{e}^{-kr/2}\\&=\frac{k^3}{2}\int_0^{+\infty}\mathrm{d}r\mathrm{e}^{-kr}\left(-g^2r^{1/2}+\frac{\hbar^2}{2m}kr-\frac{k^2\hbar^2}{8m}r^2\right)\\&=\frac{k^3}{2}\left(\frac{\hbar^2}{4mk}-\frac{\sqrt{\pi}g^2}{2k^{3/2}}\right)\\&=\frac{\hbar^2}{8m}k^2-\frac{\sqrt{\pi}g^2k^{3/2}}{4}\end{aligned}$$

$\bar{H}$ 取极值时，$\delta\bar{H}/\delta k=0$，即

$$\frac{\hbar^2}{4m}k-\frac{3\sqrt{\pi}}{8}g^2k^{1/2}=0$$

得 $k_1=0$（此时 $\psi=0$，不合题要求，故舍之）

$$k_2^{\frac{1}{2}}=\frac{3\sqrt{\pi}g^2m}{2\hbar^2}$$

易证当$k_2^{\frac{1}{2}}=\dfrac{3\sqrt{\pi}g^2m}{2\hbar^2}$时，$\bar{H}$取极小值. 此时

$$\bar{H}=-\frac{27\pi^2g^8m^3}{128\hbar^6}$$

又由$E_0\leqslant\bar{H}$，所以此粒子S态最低能量的上限为

$$-\frac{27\pi^2g^8m^3}{128\hbar^6}$$

11.23 求自旋为1的粒子的极化矢量和密度矩阵

题 11.23 由下列3个纯自旋态不相干混合成的自旋为1的粒子体系，每个态都是等概率的，即粒子在$\psi^{(1)}$，$\psi^{(2)}$，$\psi^{(3)}$态的概率均为$\frac{1}{3}$

$$\psi^{(1)}=\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix},\qquad \psi^{(2)}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}+\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix},\qquad \psi^{(3)}=\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$$

(1) 对于这3个纯态分别计算极化矢量$\boldsymbol{P}$. (2) 对上述混合态求其单个粒子的极化矢量$\boldsymbol{P}$. (3) 计算这个体系的密度矩阵ρ，并验证$\mathrm{Tr}\rho=1$. (4) 用ρ求极化矢量$\boldsymbol{P}$并验证(2).

提示 对于$J=1$

$$J_x=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix},\qquad J_y=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}&0\\\mathrm{i}&0&-\mathrm{i}\\0&\mathrm{i}&0\end{pmatrix},\qquad J_z=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$$

解 (1) 利用公式

$$P^{(i)}=\left\langle\psi^{(i)}\middle|J\middle|\psi^{(i)}\right\rangle$$

可得

$$P_x^{(1)}=\frac{1}{\sqrt{2}}(1,0,0)\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}=0$$

$$P_y^{(1)}=\frac{1}{\sqrt{2}}(1,0,0)\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}&0\\\mathrm{i}&0&-\mathrm{i}\\0&\mathrm{i}&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}=0$$

$$P_z^{(1)}=(1,0,0)\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}=1$$

所以

$$P^{(1)}=(0,0,1)$$

同理可算得

$$P^{(2)}=\left(\frac{1}{\sqrt{2}},0,-\frac{1}{2}\right)$$

$$P^{(3)}=(0,0,-1)$$

(2) 对于混合态，非相干相加，故

$$P=\frac{1}{3}\left(P^{(1)}+P^{(2)}+P^{(3)}\right)=\frac{1}{6}\left(\sqrt{2},0,-1\right)$$

(3) 取正交归一基为

$$|1\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix},\qquad |2\rangle=\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix},\qquad |3\rangle=\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$$

则

$$\left|\psi^{(1)}\right\rangle=|1\rangle,\qquad \left|\psi^{(2)}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle+|3\rangle),\qquad \left|\psi^{(3)}\right\rangle=|3\rangle$$

可一般记成$\left|\psi^{(i)}\right\rangle=\sum\limits_{N=1}^{3}C_n^i|n\rangle, i=1,2,3$；又$\omega^{(i)}=\frac{1}{3}$，根据密度矩阵定义$\rho=\sum\omega^{(i)}\left|\psi^{(i)}\right\rangle\left\langle\psi^{(i)}\right|$，知

$$\rho_{mn}=\sum_i\omega^i C_n^{i*}C_m^i=\frac{1}{3}\sum_i C_n^{i*}C_m^i$$

也即

$$\rho=\begin{pmatrix}\frac{1}{3} & 0 & 0\\ 0 & \frac{1}{6} & \frac{1}{6}\\ 0 & \frac{1}{6} & \frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

$$\mathrm{Tr}\rho=\frac{1}{3}+\frac{1}{6}+\frac{1}{2}=1$$

(4)
$$P=\langle J\rangle=\mathrm{Tr}(\rho J).$$

$$P_x=\mathrm{Tr}\rho J_x=\frac{\sqrt{2}}{6}$$

$$P_y=\mathrm{Tr}\rho J_y=0$$

$$P_z=\mathrm{Tr}\rho J_z=-\frac{1}{6}$$

与(2)完全一致.

11.24　氘核电离后的波函数及自旋的相关性

题 11.24　氘核是中子和质子的一个束缚态，这时两个核子的自旋耦合的总角动量为S=1. 吸收一个能量高于2.2MeV的γ光子，氘核就可分解为一个自由中子和一个自由质子. (1) 用平面波及两个核子的合适的自旋坐标写出反应$\gamma+D\rightarrow n+p$的末态波函数. 假定与γ

光子的相互作用为电偶极矩耦合. (2) 假设在氘核分解后，在相互距离很远处探测中子和质子. 在质心系中观察，求出对时间、空间以及自旋的关联. 假定靶中氘核为非极化的. (自旋关联的定义为：如果质子的自旋测出为“向上”，那么相应的中子的自旋被探测到为“向上”的概率为多大？)

解 (1) 电偶极矩作用要求(n,p)宇称为 -1, 设(n,p)波函数为$\psi(n,p)\sim\psi(r_n,r_p)\chi(n,p)$，对 $\chi=\chi_1^3$ 交换核子后 $\psi(p,n)=(-1)^l\psi(n,p)$；对 $\chi=\chi_0^1$ 交换核子后变为 $\psi(p,n)=(-1)^{l+1}\psi(n,p)$. Fermi 子系统要求交换反对称，前者$l=1,3,\cdots$，后者$l=0,2,4,\cdots$，相应的宇称分别为$-1$ 和$+1$. 考虑宇称守恒,唯有$\chi=\chi_1^3$即自旋三态可能. $S=1$，$L=1,3,\cdots$可得$J=0,1,2,\cdots$, 可以满足电偶极耦合 $\Delta I=0$ 或 1 的要求. 因氘核非极化，χ_{11}，χ_{10}和χ_{1-1}所取概率相等. 故用平面波及自旋波将(n,p)表示为

$$\psi(n,p)\sim e^{i(k_n\cdot r_n+k_p\cdot r_p)}\cdot e^{-i(\omega_n t+\omega_p t)}\cdot\frac{1}{\sqrt{3}}(\chi_{1,1}+\chi_{1,0}+\chi_{1,-1})$$

(2) 时间和空间关联分别意味着能量和动量守恒. 故在质心系中，如果测得质子能量为E_p，则中子能量将被探测到$E_n=E_{cm}-E_p$；如果测得质子动量为P，则中子动量将为$-P$.

为求质子“向上”自旋时，中子自旋“向上”的概率，将自旋波函数部分重新写为

$$\begin{aligned}\chi(n,p)&=\frac{1}{\sqrt{3}}\left(\chi_{1,1}+\chi_{1,0}+\chi_{1,-1}\right)\\&=\frac{1}{\sqrt{3}}\left[\alpha(n)+\frac{1}{\sqrt{2}}\beta(n)\right]\alpha(p)+\frac{1}{\sqrt{3}}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\chi(n)+\beta(n)\right]\beta(p)\end{aligned}$$

可见，取$\alpha(p)$时，n 取$\alpha(n)$的概率为

$$\frac{\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)^2}{\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)^2+\left(\frac{1}{\sqrt{6}}\right)^2}=\frac{2}{3}$$

11.25 求两个全同粒子的配分函数和能量

题 11.25 (1) 设有一个由两个全同粒子组成的系统，粒子可以占据下面三个能级中的任意一个

$$\varepsilon_n=n\varepsilon,\qquad n=0,1,2$$

最低能级$\varepsilon_0=0$为二重简并. 系统在温度T下处于热平衡. 对下面每种情形，仔细数清组态的数目，给出配分函数和能量：①粒子服从 Fermi 统计；②粒子服从 Bose 统计；③粒子服从 Boltzmann 统计(这时粒子是可以区分的). (2) 讨论在什么条件下 Fermi 子和 Bose 子可以当作 $P(3)=(0,0,1)$粒子处理.

解 (1) 记$\varepsilon_0=0$的两个态为A、B，ε，2ε 的态为 1，2. 把系统的组态用两个粒子分别对所处状态的集合进行标记，在 Fermi 子的情况下，两个粒子的系统可能处于下列六种组态之一

	(A, B)	(A, 1)	(B, 1)	(A, 2)	(B, 2)	(1, 2)
能量	0	ε	ε	2ε	2ε	3ε

配分函数

$$Z=1+2e^{-\varepsilon}+2e^{-2\varepsilon}+e^{-3\varepsilon}$$

平均能量

$$\bar{\varepsilon}=(2\varepsilon e^{-\varepsilon}+4\varepsilon e^{-2\varepsilon}+3\varepsilon e^{-3\varepsilon})/Z$$

在 Bose 子情况还要加上

	(A,A)	(B,B)	$(1,1)$	$(2,2)$
能量	0	0	$2a$	$4a$

所以

$$Z=3+2e^{-\varepsilon}+3e^{-2\varepsilon}+e^{-3\varepsilon}+e^{-6\varepsilon}$$

$$\bar{\varepsilon}=\frac{1}{Z}(2\varepsilon e^{-\varepsilon}+6\varepsilon e^{-2\varepsilon}+3\varepsilon e^{-3\varepsilon}+4\varepsilon e^{-6\varepsilon})$$

在 Boltzmann 粒子情况下，粒子可以区分，还要计及(B,A)、$(1,A)$、$(1,B)$、$(2,A)$、$(2,B)$、$(2,1)$等态

$$Z=4+4e^{-\varepsilon}+5e^{-2\varepsilon}+2e^{-3\varepsilon}+e^{-4\varepsilon}$$

$$\bar{\varepsilon}=\frac{1}{Z}(4\varepsilon e^{-\varepsilon}+10\varepsilon e^{-2\varepsilon}+6\varepsilon e^{-3\varepsilon}+4\varepsilon e^{-4\varepsilon})$$

(2) 当粒子数远远小于能级数目时，交换效应可忽略，Fermi 子和 Bose 子就可以当作 Boltzmann 粒子处理.

11.26 边界面附近的一个自由电子的扩散问题

题 11.26 设有处于边界面附近的一个自由电子. (1) 如果$\phi_k(x)$是电子的本征函数，证明

$$u(x,t)=\sum_k \phi_k^*(x)\phi_k(0)\exp\left(\frac{-\varepsilon_k t}{\hbar}\right)$$

是某个扩散方程的解. 确定相应的扩散系数. (2) 由扩散理论的知识，你预料距原点为 l 的边界的存在会怎样影响$u(0,t)$（电子会立刻还是经过一段时间才感觉到边界的存在)? (3)考察(1)中给出的 $u(0,t)$ 作为 k 的求和式，在电子感到边界的存在时，哪个范围内的 ε_k 对 $u(0,t)$ 贡献较明显?

解 (1) $\phi_k(x)$满足自由粒子的 Schrödinger 方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi_k(x)=\varepsilon_k\phi_k(x)$$

所以

$$\nabla^2 u(x,t)=-\frac{2m}{\hbar^2}\sum_k \varepsilon_k\phi_k^*(x)\phi_k(0)\exp\left(-\frac{\varepsilon_k t}{\hbar}\right)$$

而

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x,t)=-\frac{1}{\hbar}\sum_k \varepsilon_k\phi_k^*(x)\phi_k(0)\exp\left(-\frac{\varepsilon_k t}{\hbar}\right)$$

所以 $u(x,t)$ 满足扩散方程

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x,t)=\frac{\hbar}{2m}\nabla^2 u(x,t)$$

扩散系数为 $\frac{\hbar}{2m}$.

(2) $u(x,0)=\delta(x), t>0$ 时电子的函数 u 开始向两侧扩散，电子要过一段时间后才会感到边界的存在.

(3) 设边界面为 $x=l$，扩散方程的解为

$$u(x,t)=c\exp\left[-\frac{m}{2\hbar t}(y^2+z^2)\right]\left\{\exp\left(-\frac{m}{2\hbar t}x^2\right)-\exp\left[-\frac{m}{2\hbar t}(x-2l)^2\right]\right\}$$

没有边界面存在时，方括号里只有第一项，当 $\frac{m}{2\hbar t}(0-2l)^2\sim 1$ 时，电子明显地感到边界的存在

$$t\sim\frac{2ml^2}{\hbar}$$

只有 $\frac{\varepsilon_k t}{\hbar}\leqslant 1$ 的那些 ε_k 才有明显贡献，即

$$\varepsilon k\leqslant\frac{\hbar^2}{2ml^2}$$

11.27 由“混合偶极子”的场角动量量子化导出 Dirac 量子化条件

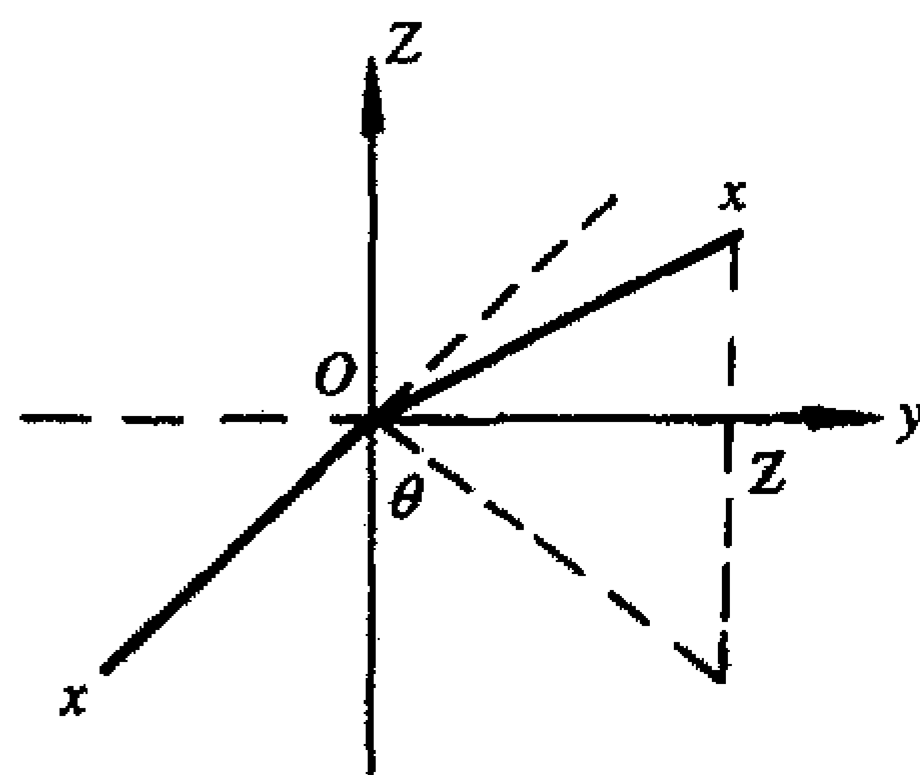
题 11.27 通过假定存在一荷强度为 g 的磁单极而将 Maxwell 方程对称化，Dirac 导出了一个量子化条件

$$\frac{eg}{\hbar c}=n,\qquad n\text{ 为整数}$$

式中，e 为电子电荷，g 为磁荷. 按照 Bohr-Sommerfeld 量子化步骤，通过将“混合偶极子”系统的场角动量量子化的方法，半经典地导出类似的量子化条件.

提示 该场的角动量 Poynting 矢量有何关系？

解 如题图 11.27 所示混合偶极子系统的全空间电磁场分布为



题图 11.27

$$\boldsymbol{E}=e\frac{\boldsymbol{x}-\frac{\boldsymbol{r}}{2}}{\left|\boldsymbol{x}-\frac{\boldsymbol{r}}{2}\right|^3},\qquad \boldsymbol{B}=g\frac{\boldsymbol{x}+\frac{\boldsymbol{r}}{2}}{\left|\boldsymbol{x}+\frac{\boldsymbol{r}}{2}\right|^3}$$

取柱坐标

$$\frac{\boldsymbol{r}}{2}=a\boldsymbol{e}_3$$

$$\boldsymbol{x}=\rho\cos\theta\boldsymbol{e}_1+\rho\sin\theta\boldsymbol{e}_2+z\boldsymbol{e}_3$$

电磁角动量为

$$L_{em}=\frac{1}{4\pi c}\int \boldsymbol{x}\times(\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B})\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}$$

而

$$\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B}=eg\frac{\left(\boldsymbol{x}-\frac{\boldsymbol{r}}{2}\right)\times(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{r}/2)}{\left|\boldsymbol{x}-\frac{\boldsymbol{r}}{2}\right|^3\cdot\left|\boldsymbol{x}+\frac{\boldsymbol{r}}{2}\right|^3}=eg\frac{\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{r}}{\left|\boldsymbol{x}-\frac{\boldsymbol{r}}{2}\right|^3\cdot\left|\boldsymbol{x}+\frac{\boldsymbol{r}}{2}\right|^3}$$

利用

$$\boldsymbol{x}\times(\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{r})=(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{r})\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^2\boldsymbol{r}$$

$$\int_0^{2\pi}\cos\theta\mathrm{d}\theta=\int_0^{2\pi}\sin\theta\mathrm{d}\theta=0$$

得

$$\begin{aligned}L_{em}&=-\frac{aeg}{2\pi c}e_3\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}z\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\frac{\rho^2}{[(\rho^2+z^2+a^2)^2-4a^2z^2]^{3/2}}\\&=-e_3\left(\frac{eg}{c}\right)\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}t\int_0^{\infty}\frac{s^3\mathrm{d}s}{[(s^2+t^2+1)^2-4t^2]^{3/2}}\end{aligned}$$

式中 $s=\rho/a, t=z/a$.

应用

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}t\int_0^{\infty}\frac{s^3\mathrm{d}s}{[(s^2+t^2+1)^2-4t^2]^{3/2}}=1$$

得

$$L_{em}=-\frac{eg}{c}e_3$$

量子化条件为

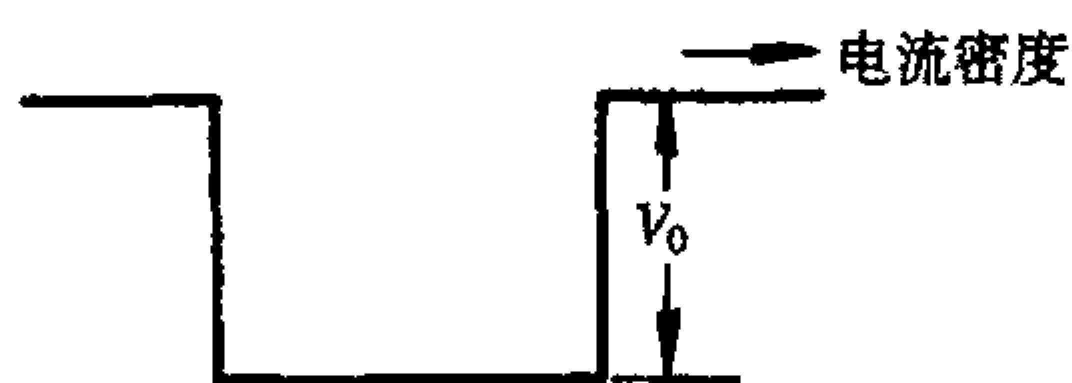
$$|L_{emz}|=n\hbar=-\frac{eg}{c},\qquad n=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \cdots$$

所以

$$\frac{eg}{\hbar c}=n,\qquad n=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \cdots$$

11.28　金属中的热电子发射

题 11.28　作为一种粗糙的图像，把金属看成由关在阱深为 V_0 的势阱中的自由电子组成的体系(题图 11.28)，由于热激发，具有足够高能量的电子将逃出势阱，求发射电流密度并加以讨论.



题图 11.28

解　金属中的电子气服从 Fermi 离开单位表面的电子数为

$$j_n=\frac{1}{V}\int\mathrm{d}^3p\frac{1}{\mathrm{e}^{(\varepsilon-\mu)/(kT)}+1}\cdot2\frac{V}{h^3}v_z,\qquad v_z>\sqrt{2mV_0}$$

式中 2 是电子自旋引起的简并度，v_z 方向向上

$$j_n=\frac{2}{mh^3}\int_{\sqrt{2mV_0}}^{\infty}P_z\mathrm{d}P_z\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}P_x\mathrm{d}P_y}{\exp\left\{\left[\frac{1}{2m}\left(P_x^2+P_y^2+P_z^2\right)-\mu\right]\Big/kT\right\}+1}$$

$$=\frac{4\pi}{mh^3}\int_{\sqrt{2mV0}}^{\infty}P_z\mathrm{d}P_z\int_0^{\infty}\frac{P_r\mathrm{d}P_r}{\exp\left\{\left[\frac{1}{2m}\left(P_z^2+P_y^2\right)-\mu\right]\Big/kT\right\}+1}$$

$$=\frac{4\pi kT}{h^3}\int_{\sqrt{2mV_0}}^{\infty}P_z\mathrm{d}P_z\ln\left[1+\exp\left[-\left(\frac{1}{2m}P_z^2-\mu\right)\Big/kT\right]\right]$$

$$=\frac{4\pi kT}{h^3}\int_{\sqrt{2mV_0}}^{\infty}P_z\mathrm{d}P_z\exp\left[-\left(\frac{P_z^2}{2m}-\mu\right)\Big/kT\right]$$

$$=\frac{4\pi kT}{h^3}\cdot mkT\cdot \mathrm{e}^{-(V_0-\mu)/kT}$$

$$=\frac{4\pi mk^2T^2}{h^3}\mathrm{e}^{-(V_0-\mu)kT}$$

而电流密度

$$j_e=-ej_n=-\frac{4\pi mek^2T^2}{h^3}\mathrm{e}^{-(V_0-\mu)/kT}$$

其中利用了$kT\ll\frac{1}{2m}\cdot 2mV_0-\mu$. 在常温下，$\mu\approx\mu_0=\frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2n)^{2/3}$，$n$为电子数密度. $V_0-\mu$即通常所说的功函数. 这一热电子发射效应称为 Richardson 效应.

11.29 中微子振荡与测量

题 11.29 通常认为至少存在三种不同的中微子，可以通过产生或吸收中微子的反应将它们区分开来. 我们称这三种中微子为ν_e，ν_μ和ν_τ. 已经认识到每种中微子有一很小但又确定的质量，且互不相同. 在本题中，让我们假设在这三种中微子之间存在一微扰作用，除此之外，它们具有相同的静质量M_0. 在每两种中微子之间的微扰矩阵元有相同的实数值$\hbar\omega_1$，而在每个ν_e、ν_μ和ν_τ态中微扰的期望值为0. (1) 在0时刻静止地产生了一个ν_e中微子，问作为时间的函数，这个中微子在另外两个态的概率为多大? (2) 设计了一个实验来探测这种“中微子振荡”. 中微子的飞行距离为2000m，它们的能量为100GeV. 如果有1%的他种中微子存在，则在实验灵敏度范围内肯定可测出. 取M_0为20eV，问能被测量出的最小$\hbar\omega_1$值为多少? 它如何依赖于M_0?

解 (1) 在$|\nu_e\rangle$、$|\nu_\mu\rangle$和$|\nu_\tau\rangle$构成的表象中，系统的 Hamilton 量的矩阵为

$$\begin{pmatrix} M_0 & \hbar\omega_1 & \hbar\omega_1 \\ \hbar\omega_1 & M_0 & \hbar\omega_1 \\ \hbar\omega_1 & \hbar\omega_1 & M_0 \end{pmatrix}$$

于是概率幅满足下列方程组

$$i\hbar\begin{pmatrix}\dot{a}_1\\ \dot{a}_2\\ \dot{a}_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}M_0 & \hbar\omega_1 & \hbar\omega_1\\ \hbar\omega_1 & M_0 & \hbar\omega_1\\ \hbar\omega_1 & \hbar\omega_1 & M_0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\ a_2\\ a_3\end{pmatrix}$$

初始条件为

$$a_1(0)=1,\qquad a_2(0)=a_3(0)=0$$

由此可解出

$$\begin{cases}a_1(t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}M_0t/\hbar}\left(\dfrac{2}{3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}w_1t}+\dfrac{1}{3}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2w_1t}\right)\\ a_2(t)=\dfrac{1}{3}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}M_0t/\hbar}\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2w_1t}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}w_1t}\right)\\ a_3(t)=\dfrac{1}{3}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}M_0t/\hbar}\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2w_1t}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}w_1t}\right)\end{cases}$$

从而

$$\begin{cases}P(\nu_\mu)=|a_2(t)|^2=\dfrac{2}{9}(1-\cos3\omega_1t)\\ P(\nu_\tau)=|a_3(t)|^2=\dfrac{2}{9}(1-\cos3\omega_1t)\end{cases}$$

(2) 时间间隔为(注意：应在 ν_e 静止系中考虑)

$$T=\sqrt{1-v^2}\cdot\frac{l}{v}=\frac{M_0}{E}\cdot\frac{l}{P/E}=\frac{M_0l}{P}\approx\frac{M_0l}{E},\qquad c=1$$

要使 $P(\nu_\mu)=1\%$，必须有

$$\frac{2}{9}(1-\cos3\omega_1T)=0.01$$

$$\cos3\omega_1T=0.955$$

最小的 ω_1 值为

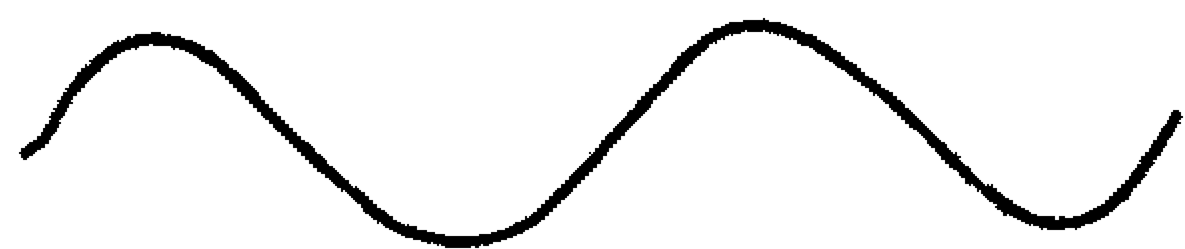
$$\omega_1=\frac{\arccos0.955}{3T}\approx\frac{0.301}{3T}$$

所以

$$\hbar\omega_1=\frac{0.301\hbar}{3T}=0.1\frac{\hbar Ec}{M_0l}=7.88\times10^{-21}\,\mathrm{J}=0.05\mathrm{eV}$$

11.30 用近似法求周期势中电子的能级及能带宽度

题 11.30 作为良好的近似，晶格中电子经受一个周期势场作用(题图 11.30). Floque 定理也是物理事实，指出任意周期势场中的能谱分离成带有“能隙”的连续的能带. 为了构造一个关于这种效应的很粗略的模型(对最低能带)，设想“栅栏”非常高，以致于“基态”集 $|n\rangle(-\infty<n<+\infty)$ 是近似的本征态，



题图 11.30

这里 $|n\rangle$ 为第 n 个阱中的基态. 记每个 $|n\rangle$ 的能量为 E_0，设两个相邻势阱之间的穿透振幅为

$\varepsilon=|\varepsilon|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}$(即$|n-1\rangle\leftarrow|n\rangle\rightarrow|n+1\rangle$的概率为$|\varepsilon|^2$，$\varepsilon$很小). 建立一个 Hermite 的 Hamilton 量表示上述假设，并计算态

$$|\theta\rangle=\sum_{n=-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{in\theta}|n\rangle$$

的能量，其能带宽度为多大?

解 可以用矩阵来表示所需要的 Hamilton 量 H. 这里取基底为$|n\rangle$. 设

$$H|n\rangle=E_0(1-\varepsilon-\varepsilon^*)|n\rangle+E_0\varepsilon|n+1\rangle+E_0\varepsilon^*|n-1\rangle$$

则

$$\begin{aligned}\langle m|H|n\rangle&=\int\psi^*(x-ma)H\psi(x-na)dx=\langle m|\left[E_0(1-\varepsilon-\varepsilon^*)|n\rangle+E_0\varepsilon|n+1\rangle+E_0\varepsilon^*|n-1\rangle\right]\\&=\delta_{mn}E_0(1-\varepsilon-\varepsilon^*)+\delta_{m,n+1}\varepsilon E_0+\delta_{m,n-1}\varepsilon^*E_0\end{aligned}$$

其中利用了只有相邻势阱才有相互透射的假定，且略去$|\varepsilon|^2$的项，并认为向右为$|\varepsilon|e^{i\alpha}$，向左为$|\varepsilon|^{-i\alpha}$. 故 H 矩阵为

$$H=\begin{matrix}\langle 1|\\\langle 2|\\\langle 3|\\\vdots\end{matrix}\begin{Bmatrix}E_0(1-\varepsilon-\varepsilon^*) & \varepsilon E_0 & & 0\\ \varepsilon^*E_0 & E_0(1-\varepsilon-\varepsilon^*) & \varepsilon E_0 & \ddots\\ & \varepsilon^*E_0 & E_0(1-\varepsilon-\varepsilon^*) & \ddots\\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots\end{Bmatrix}$$

$$\qquad\qquad|1\rangle\qquad|2\rangle\qquad|3\rangle\cdots$$

$$\begin{aligned}H|\theta\rangle&=E_0\sum_{n=-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{in\theta}|n\rangle(1-\varepsilon-\varepsilon^*)+\sum_{n=-\infty}^{+\infty}E_0\mathrm{e}^{in\theta}\cdot\{\varepsilon|n+1\rangle+\varepsilon^*|n-1\rangle\}\\&=E_0(1-2|\varepsilon|\cos\alpha)|\theta\rangle+E_0\sum_{n=-\infty}^{+\infty}\left\{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(n-1)\theta}\varepsilon+\mathrm{e}^{\mathrm{i}(n+1)\theta}\varepsilon^*\right\}|n\rangle\\&=E_0\left[1-2|\varepsilon|\cos\alpha+2|\varepsilon|\cos(\theta-\alpha)\right]|\theta\rangle\end{aligned}$$

于是$|\theta\rangle$的本征值即能量为

$$E_\theta=E_0\left[1-2|\varepsilon|(\cos\alpha-\cos(\theta-\alpha))\right]=E_0\left[1-4|\varepsilon|\sin\frac{\theta}{2}\sin\left(\frac{\theta}{2}-\alpha\right)\right]$$

由这两个表达式可知：

(1) 由于θ连续变化，造成能量的连续变化，即能级成为能带. 当$\theta=\alpha$，$E_\theta=E_{\max}=E_0\{1+2|\varepsilon|(1-\cos\alpha)\}$；当$\theta=\pi+\alpha$，$E_\theta=E_{\min}=E_0\{1-2|\varepsilon|(1+\cos\alpha)\}$. 故带宽为$4|\varepsilon|E_0$.

(2) 当(由周期势阱形状所决定的)□ 够小时，这种相邻势阱的透射总是使基态能量比原先单个阱中的基态能量更低

11.31 求被铝原子俘获的μ子的能级、平均半径

题 11.31 考虑一个理想化的铝原子(点电荷，$Z=13$，$A=27$). 如果一个轻子或μ子被这个原子俘获，它会迅速地进入电子壳层内的较低的 n 态上. 在μ子俘获情况下：(1) 当μ子在 $n=1$ 轨道上时，计算能量 E_1，再估计平均半径. 忽略相对论效应及核的运动. (2) 考虑核的运动，计算 E_1 的修正. (3) 略去自旋，求出由于相对论效应引起的 Hamilton 量的微扰项，并估计这项修正. (4) 定义核的半径. 将铝核的半径与(1)中 $n=1$ 轨道的平均半径相比较. 定性地讨论，当μ^-的原子波函数与核显著地重叠时，对μ^-将会发生什么？在类似条件下对π^-子呢？

解 (1) 在本题中可以不考虑核外电子的影响，即只考虑μ子在 $Z=13$ 的核的 Coulomb 场中运动.

μ子的能级为(非相对论近似)

$$E_n=-\frac{me^4}{2\hbar^2}\cdot\frac{Z^2}{n^2}$$

$$E_1=-\frac{m}{m_e}\cdot\frac{m_e e^4}{2\hbar^2}Z^2=-\frac{105}{0.51}\times 13.6\text{eV}\times 13^2=-0.4732(\text{MeV})$$

$$a=\frac{\hbar^2}{Zme^2}=\frac{m_e}{Zm}\cdot\frac{\hbar^2}{m_e e^2}=\frac{0.5}{13\times 105}\times 0.53\text{Å}=1.9\times 10^{-4}(\text{Å})$$

(2) 考虑核的运动时，只需将质量 m 用折合质量 $\mu=\dfrac{Mm}{M+m}$ 代替即可. 于是

$$E_1'=\frac{\mu}{m}E_1=\frac{1}{1+\dfrac{m}{M}}E_1\frac{1}{1+\dfrac{105}{27\times 938}}\times(-473200\text{eV})=-0.4712(\text{MeV})$$

(3) 相对论效应的微扰项可如下求出

$$T=\sqrt{p^2c^2+m^2c^4}-mc^2=\frac{p^2}{2m}-\frac{p^4}{8m^2c^2}+\cdots$$

所以

$$H=-\frac{p^4}{8m^3c^2}$$

它对 E_1 的修正可如下考虑

$$\begin{aligned}\Delta E&=\langle 100|-\frac{p^4}{8m^3c^2}|100\rangle\\&=-\frac{1}{2mc^2}\langle 100|\frac{p^2}{2m}\cdot\frac{p^2}{2m}|100\rangle\\&=-\frac{1}{2mc^2}\langle 100|\left(H+\frac{Ze^2}{r}\right)\left(H+\frac{Ze^2}{r}\right)|100\rangle\\&=-\frac{1}{2mc^2}\langle 100|\left(E_1+\frac{Ze^2}{r}\right)^2|100\rangle\end{aligned}$$

由于我们只需估计这项积分，故可得 $r\sim a$，从而有

$$\Delta E=-\frac{1}{2mc^2}\left(E_1+\frac{Ze^2}{a}\right)^2\approx-\frac{|E_1|^2}{2mc^2}=-1057.5(\text{eV})$$

(4) 原子核的半径可表示成质量数 A 的函数

$$r=r_0A^{1/3}$$

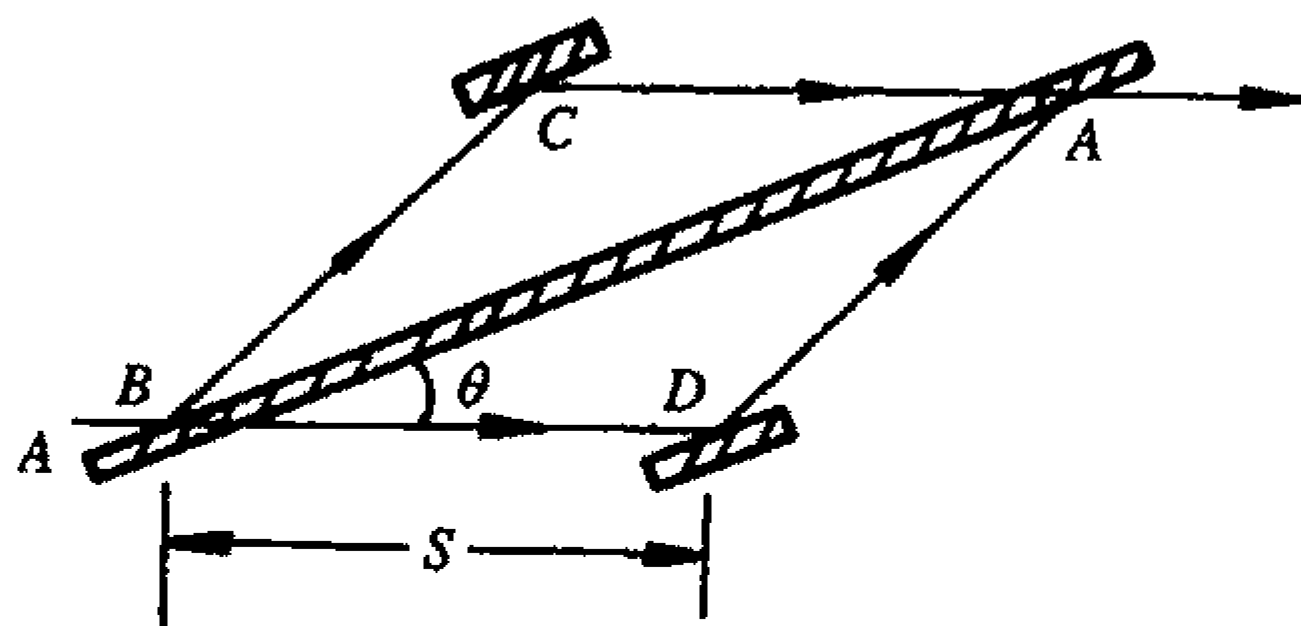
式中 $r_0\sim1.2\times10^{-13}$cm. 于是铝核的半径为

$$r=1.2\times10^{-13}\times27^{1/3}\text{cm}=3.6\times10^{-5}\,(\text{Å})$$

可见它与μ的第一轨道半径相差不很大. 这时μ子波函数与核显著重叠，于是核的体积效应将给出一个正能量修正. 同时，μ子与核的磁矩在发生强烈作用. 在相似环境下的 π^- 子仍然存在体积效应，但无磁矩相互作用.

11.32 用中子干涉仪测重力加速度

题 11.32 核反应堆中出来的低能中子已被用来检验重力导致的量子干涉. 如题图 11.32所示，从 A 入射的中子经过两等长路径 $ABCEF$ 及 $ABDEF$，并且在 E 处会发生干涉效应. 使中子偏转的三块平行的原板是从一块单晶上切下的. 为了改变引力势能的效应，整个系统可绕 ABD 轴转动(题图 11.32). 如果 ϕ 是转动角(当路径 $ABCEF$ 在水平面时，取 $\phi=0$)，(1) 证明由于引力效应在 E 处的相位差可以表示成 $\beta=q\sin\phi$，其中 $q=K\lambda S^2\sin2\theta$，$\lambda$是中子的波长；$K$ 是依赖于中子质量 M、引力加速度 g、Planck 常量 $\hbar$ 和数值因子的适当常数. 试确定 K. 假定引力势差与中子动能相比很小. (2) 实验中所用的中子波长为 1.45Å. 中子的相应的动能是多少电子伏特? (3) 如果 $S=4$cm，$\theta=22.5°$且 $\lambda=1.45$Å. 当 ϕ 从$-90°$变到 $+90°$时在 F 处的中子探测器中应出现多少次极大? 中子质量为 939MeV/c^2，$\hbar c=1.97\times10^{-11}$MeV·cm.



题图 11.32

解 (1) 中子的波函数可以写成

$$\psi(x,t)=c\mathrm{e}^{(\mathrm{i}p\cdot r-\mathrm{i}Et)/\hbar}$$

在沿着固定轨道运动时，有

$$\psi(r,t)=c\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^i\sqrt{2m(E-V)}\mathrm{d}x-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et\right]$$

所以相位

$$\varphi=\frac{1}{\hbar}\int_0^j\sqrt{2m(E-V)}\mathrm{d}x-\frac{1}{\hbar}Et$$

在 B 处两束中子分开，因而有 $\varphi_{B_1}=\varphi_{B_2}$.

在 BC 及 DE 段上情况对两束中子一样，因而有

$$\Delta\varphi_{CB}=\Delta\varphi_{ED}$$

在 BD 段上，有

$$V=0,\qquad E=E_0$$

$$\Delta\varphi_{DB}=\frac{1}{\hbar}\int_0^s\sqrt{2mE_0}\cdot\mathrm{d}x-\frac{1}{\hbar}E_0\cdot\frac{S}{U_0}=\frac{1}{\hbar}\left(\sqrt{2mE_0}\cdot S-\frac{1}{2}\sqrt{2mE_0}S\right)=\frac{1}{\hbar}\cdot\frac{1}{2}S\cdot\sqrt{2mE_0}$$

在 CE 段上

$$\Delta\varphi_{EC}=\frac{1}{\hbar}\int_0^i\sqrt{2m(E_0-V)}\mathrm{d}x-\frac{1}{\hbar}E_0t'$$

$$V=mgh=mg\cdot BE\cdot\sin\theta\sin\varphi,\qquad BE=2S\cos\theta$$

所以

$$V=mg\cdot S\cdot\sin 2\theta\sin\varphi$$

$$\Delta\varphi_{EC}=\frac{S}{\hbar}\sqrt{2mE_0}\sqrt{1-\frac{V}{E_0}}-\frac{1}{\hbar}E_0t'$$

$$=\frac{S}{\hbar}\sqrt{2mE_0}\sqrt{1-\frac{V}{E_0}}-\frac{1}{\hbar}E_0\frac{S}{\sqrt{\frac{2(E_0-V)}{m}}}$$

所以到 F 处两束中子的位相差为

$$\Delta\varphi=\frac{1}{\hbar}\cdot\frac{1}{2}S\sqrt{2mE_0}-\frac{S}{\hbar}\sqrt{2mE_0}\cdot\sqrt{1-\frac{V}{E_0}}+\frac{1}{\hbar}\cdot\frac{1}{2}\sqrt{2mE_0}\frac{S}{\sqrt{1-\frac{V}{E_0}}}$$

$V\ll E_0$，有

$$\Delta\varphi=\frac{1}{2\hbar}S\cdot\sqrt{2mE_0}-\frac{S}{\hbar}\sqrt{2mE_0}\left(1-\frac{V}{2E_0}\right)+\frac{S}{2\hbar}\sqrt{2mE_0}\left(1+\frac{1}{2}\cdot\frac{V}{E_0}\right)$$

$$=\frac{SV}{2E_0\hbar}\sqrt{2mE_0}+\frac{SV}{4E_0\hbar}\sqrt{2mE_0}=\frac{3SV}{4E_0\hbar}\sqrt{2mE_0}$$

代入 V 值，有

$$\Delta\varphi=\frac{3S}{4E_0\hbar}\sqrt{2mE_0}\cdot mg\cdot S\cdot\sin 2\theta\cdot\sin\phi=q\sin\phi$$

$$q=\frac{3\sqrt{2}}{4}\frac{\sqrt{mE_0}}{E_0\hbar}\cdot m\cdot g\cdot S^2\cdot\sin 2\theta$$

因为

$$\lambda=\frac{2\pi\hbar}{p}=\frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE_0}}$$

所以

$$q=K\lambda S^2\sin 2\theta$$

式中

$$K=\frac{3m^2g}{4\pi\hbar^2}$$

(2) $\lambda=1.45\text{Å},\quad p=\dfrac{h}{\lambda}=\dfrac{hc}{\lambda c}$

$$E_K=\frac{1}{2m}\cdot\frac{(hc)^2}{c^2\lambda^2}=\frac{(hc)^2}{2mc^2\lambda^2}$$
$$=\frac{4\times3.14^2\times(1.97\times10^{-11})^2}{2\times939\times(1.45\times10^{-8})^2}=0.039(\text{eV})$$

(3) 极大的个数($\sin\phi$从-1变到 $+1$)

$$N=\left[\frac{1}{2\pi}\cdot2q\right]=\left[\frac{3}{\pi}\cdot\frac{m^2g}{4\pi\hbar^2}\cdot\lambda S^2\cdot\sin2\theta\right]$$
$$=\left[\frac{3}{4\pi^2}\cdot\frac{(mc^2)^2g}{c^2\cdot(\hbar c)^2}\lambda S^2\cdot\sin45°\right]=[30.9]=30$$

可以出现30个极大.

11.33 一维 Dirac 方程可以写成两个耦合的一阶偏微分方程组

题 11.33 考虑一维 Dirac 方程$\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial\psi}{\partial t}=H\psi$, $H=c\alpha\left(-\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial z}\right)+\beta mc^2+V(z)$

$$\alpha=\begin{pmatrix}0&\sigma_3\\\sigma_3&0\end{pmatrix},\quad \sigma_3=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix},\quad \beta=\begin{pmatrix}I&0\\0&-I\end{pmatrix},\quad I=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$$

(1) 证明$\sigma=\begin{pmatrix}\sigma_3&0\\0&\sigma_3\end{pmatrix}$与$H$对易. (2) 用(1)的结果证明一维 Dirac 方程可以写成两个耦合的一阶偏微分方程组.

证明 (1) 由于$[\sigma,\alpha]=\left[\begin{pmatrix}\sigma_3&0\\0&\sigma_3\end{pmatrix},\begin{pmatrix}0&\sigma_3\\\sigma_3&0\end{pmatrix}\right]=0$, $[\sigma,\beta]=\left[\begin{pmatrix}\sigma_3&0\\0&\sigma_3\end{pmatrix},\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\right]=0$

所以

$$[\sigma,H]=[\sigma,c\alpha P_z+\beta mc^2+V]=0$$

(2) 由(1)知, 可以求σ和H的共同本征函数. σ 本征值为±1, 相应的本征函数为

$$\psi_1\begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix}+\psi_3\begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix}\qquad \psi_2\begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix}+\psi_4\begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix}$$

代入 Dirac 方程

$$\left(-\mathrm{i}\hbar c\frac{\partial}{\partial z}+V\right)\begin{pmatrix}\psi_3\\0\\\psi_1\\0\end{pmatrix}+mc^2\begin{pmatrix}\psi_1\\0\\-\psi_3\\0\end{pmatrix}=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\psi_1\\0\\\psi_3\\0\end{pmatrix}$$

$$\left(-\mathrm{i}\hbar c\frac{\partial}{\partial z}+V\right)\begin{pmatrix}0\\-\psi_4\\0\\-\psi_2\end{pmatrix}+mc^2\begin{pmatrix}0\\\psi_2\\0\\-\psi_4\end{pmatrix}=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}0\\\psi_2\\0\\\psi_4\end{pmatrix}$$

即得到两个耦合的一阶偏微分方程组. 但实际上只有一组独立，如令$\psi_3 \to -\psi_4$, $\psi_1 \to \psi_2$，就把第一组方程变到了第二组.

11.34　自由粒子的 Dirac 方程及其平面波解

题 11.34　(1) 写出自由粒子的 Dirac 方程的 Hamilton 形式, 并给出 Dirac 矩阵的显式. (2) 证明 H 与 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{P}$ 对易. $\boldsymbol{P}$ 为动量算符, $\boldsymbol{\sigma}$ 为四分量旋量空间的 Pauli 矩阵. (3) 在 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{P}$ 为对角的表达式中求出 Dirac 方程的平面波解，这里 $\boldsymbol{P}$ 为动量算符的本征值.

解　(1)

$$H = c\boldsymbol{\alpha}\cdot(-\mathrm{i}\hbar\nabla) + \beta mc^2$$

式中

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \qquad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

(2)

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{P} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{P} \end{pmatrix}$$

$$[\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{P}, H] = \left[\begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{P} & 0 \\ 0 & -\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{P} \end{pmatrix}, c\begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{P} \\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{P} & 0 \end{pmatrix} + mc^2\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\right] = 0$$

(3) 取 $\boldsymbol{P}$ 在 z 方向，$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{P}$ 就是对角的

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & \sigma_z \end{pmatrix} P_z = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & 1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix} P_z$$

其本征矢为$\begin{pmatrix} \alpha \\ 0 \\ \gamma \\ 0 \end{pmatrix} \mathrm{e}^{\mathrm{i}P_z\cdot Z/\hbar}$和$\begin{pmatrix} 0 \\ \beta \\ 0 \\ \delta \end{pmatrix} \mathrm{e}^{\mathrm{i}P_z\cdot Z/\hbar}$，$\alpha$和$\gamma$，$\beta$和$\delta$各可取两组不同的值. 分别代入

$$H\psi = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = E\psi$$

$$\begin{cases} cP_z\gamma + mc^2\alpha = E\alpha \\ cP_z\alpha - mc^2\gamma = E\gamma \end{cases}$$

$$E_\pm = \pm\sqrt{m^2c^4 + P_z^2c^2}$$

$$\psi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \dfrac{E_+ - mc^2}{cP_z} \\ 0 \end{pmatrix} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(P_z Z - E_\pm t)/\hbar}$$

$$\begin{cases}-cP_z\delta+mc^2\beta=E\beta\\ -cP_z\beta-mc^2\delta=E\delta\end{cases}$$

$$E_\pm=\pm\sqrt{m^2c^4+P_z^2c^2}$$

$$\psi=\begin{pmatrix}0\\1\\0\\ \dfrac{mc^2-E_\pm}{cP_z}\end{pmatrix}e^{i(P_zZ-E_\pm t)/\hbar}$$

11.35 由自由实标量场的 Lagrange 密度导出 Klein-Gordon 方程

题 11.35 考虑满足 Klein-Gordon 方程的自由实标量场 $\phi(x_\mu)_0$ ($x_\mu=x, y, z$ 对应于 $\mu=1, 2, 3, x_4=\mathrm{i}ct$). (1) 写出系统的 Lagrange 密度. (2) 用 Euler 证实 ϕ 满足 Klein-Gordon 方程. (3) 导出系统的 Hamilton 密度. 写出 Hamilton 方程组，并证明它和(2)中导出的方程是一致的.

解 (1) Lagrange 密度

$$L(x)=-\frac{1}{2}\partial_\mu\phi(x)\partial_\mu\phi(x)-\frac{m^2}{2}\phi(x)\phi(x)$$

式中 $\partial_\mu\equiv\dfrac{\partial}{\partial x_\mu}$.

(2) Euler 运动方程为

$$\partial\mu\left[\frac{\partial L(x)}{\partial(\partial_\mu\phi)}\right]-\frac{\partial L(x)}{\partial\phi(x)}=0$$

所以

$$\partial_\mu\partial_\mu\phi(x)-m^2\phi(x)=0$$

即满足 Klein-Gordon 方程.

(3)
$$H(x)=\frac{\partial L}{\partial(\partial_\mu\phi)}\partial_\mu\phi-L=-\frac{1}{2}\partial_\mu\phi\partial_\mu\phi+\frac{m^2}{2}\phi^2$$

由 Hamilton 正则方程 $\dfrac{\partial\mathcal{H}}{\partial\phi}=-\partial_\mu P_\mu$

$$\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial P_\mu}=\partial_\mu\phi$$

式中

$$P_\mu=\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial(\partial_\mu\phi)}$$

有

$$\partial_\mu\partial_\mu\phi-m^2\phi=0$$

11.36 初动量为 P 的质壳上的带电粒子发射虚光子的概率为一协变张量

题 11.36 可以证明，一个初动量为 P 的质壳上的带电粒子发射一个动量为 q 的虚光子的概率正比于协变张量

$$W_{\mu\nu} = Ag_{\mu\nu} + BP_\mu P_\nu + Cq_\mu q_\nu + D(q_\mu P_\nu + P_\mu q_\nu)$$

式中 A，B，C 和 D 是自变量 q^2、$q\cdot P$ 和 $P^2 = m^2$ 的 Lorentz 不变标量函数. (1) 用流守恒证明 $W_{\mu\nu}$ 有如下形式

$$W_{\mu\nu} = W_1\left(g_{\mu\nu} - \frac{q_\mu q_\nu}{q^2}\right) + W_2\left(P_\mu - q_\mu\frac{q\cdot P}{q^2}\right)\cdot\left(P_\nu - q_\nu\frac{q\cdot P}{q^2}\right)$$

即 A、B、C 和 D 中只有两个是独立的. (2) 对一个质量为 m 的 Dirac 粒子

$$W_{\mu\nu} = \mathrm{Tr}[(\not{P} - \not{q} + m)\gamma_\mu(\not{P} + m)\gamma_\nu]$$

计算 W_1 和 W_2.

解 (1) 流守恒要求 $q^\mu W_{-\mu\nu} = 0$，即

$$Aq_\nu + B(P\cdot q)P_\nu + cq^2q_\nu + D(q^2P_\nu + (P\cdot q)q_\nu) = 0$$

P_ν、q_ν 是独立的，$q^2 \neq 0$，所以

$$A + Cq^2 + D(P\cdot q) = 0$$

$$B(P\cdot q) + Dq^2 = 0$$

令 $A = W_1$，$B = W_2$，则有

$$C = -\frac{W_1}{q^2} + \frac{W_2(P\cdot q)}{q^4}, \qquad D = -W_2\frac{(P\cdot q)}{q^2}$$

所以

$$W_{\mu\nu} = W_1\left(g_{\mu\nu} - \frac{q_\mu q_\nu}{q^2}\right) + W_2\left(P_\mu - q_\mu\frac{q\cdot P}{q^2}\right)\cdot\left(P_\nu - q_\nu\frac{q\cdot P}{q^2}\right)$$

(2) $W_{\mu\nu} = \mathrm{Tr}[(\not{P} - \not{q} + m)\gamma_\mu(\not{P} + m)\gamma_\nu]$

$$= \mathrm{Tr}[\not{P}\gamma_\mu\not{P}\gamma_\nu + \not{P}\gamma_\mu m\gamma_\nu - \not{q}\gamma_\mu\not{P}\gamma_\nu - \not{q}\gamma_\mu m\gamma_\nu + m\gamma_\mu\not{P}\gamma_\nu + m\gamma_\mu m\gamma_\nu]$$

注意到 $\not{P} = P_\alpha\gamma^\alpha$，$\not{q} = q_\alpha\gamma^\alpha$，上式中含奇数个 γ 的那些项迹为零. 并利用

$$\mathrm{Tr}\left(\gamma_\mu\gamma_\nu\right) = 4\delta_{\mu\nu}$$

就有

$$\begin{aligned}
W_{\mu\nu} &= \mathrm{Tr}[\not{P}\gamma_\mu\not{P}\gamma_\nu - \not{q}v_\mu\not{P}\gamma_\nu + m^2\gamma_\mu\gamma_\nu] \\
&= 4[P_\alpha\delta_\mu^\alpha P_{\alpha'}\delta_\nu^{\alpha'} - P_\alpha P^\alpha\delta_{\mu\alpha'}\delta_\nu^{\alpha'} + P_\alpha\gamma_\nu^\alpha\gamma_{\mu\alpha'}P^{\alpha'}] \\
&\quad - 4[q_\alpha\delta_\mu^\alpha P_\alpha\delta_\nu^{\alpha'} - q_\alpha P^\alpha\delta_{\mu\alpha'}\delta_\nu^{\alpha'} + q_\alpha\delta_\nu^\alpha\delta_{\mu\alpha'}P^{\alpha'}] + 4m^2\delta_{\mu\nu} \\
&= 4[P_\mu P_\nu - P^2\delta_{\mu\nu} + P_\mu P_\nu] \\
&\quad - 4[q_\mu P_\nu - (q\cdot P)\delta_{\mu\nu} + q_\nu P_\mu] + 4m^2\delta_{\mu\nu}
\end{aligned}$$

对在壳上的电子 $P^2 = m^2$，故

$$W_{\mu\nu}=8P_\mu P_\nu-4(q_\mu P_\nu+q_\nu P_\mu)+4(q\cdot P)\delta_{\mu\nu}$$
$$W_1=4q\cdot P,\qquad W_2=8$$

如果注意到壳上电子在发射虚光子前后动量平方都是 m^2，即

$$P^2=m^2$$
$$(P-q)^2=P^2-2P\cdot q+q^2=m^2$$

不难验证上式中每一项都是与一般表达式一致的.

11.37 证明 Dirac 方程的协变性，并改成 Hamilton 形式

题 11.37 下面的 Dirac 方程，可以用来解释粒子的反常磁矩

$$\left(i\nabla\!\!\!/-eA\!\!\!/+K\frac{e}{4m}\sigma_{\mu\nu}F^{\mu\nu}-m\right)\psi(x)=0$$

式中 e 和 m 是粒子的电荷和质量，K 是无量纲参数，$A^\mu(x)$是四维势，$F^{\mu\nu}$ 是电磁场张量，即 $F^{\mu\nu}=\dfrac{\partial A^\mu}{\partial x_\nu}-\dfrac{\partial A^\nu}{\partial x_\mu}$，还有 $\sigma_{\mu\nu}=\dfrac{i}{2}[\gamma_\mu,\gamma_\nu]$，$\nu_\mu$是 Dirac 矩阵，$\gamma_0=\gamma^0=\beta$

$$\gamma^i=-\gamma_i=\beta\alpha^i,\qquad i=1,2,3$$

(1) 已知上述方程在 $K=0$ 时是协变的. 我们有 $\psi(x')=S\psi(x)$，其中 $x'^\mu=a^\mu_\nu x^\nu$，且 $a^\mu_\nu\gamma^\nu=S^{-1}\gamma^\mu S$，证明如果 $K\neq 0$，方程仍然是协变的. (2) 把方程改写成 Hamilton 形式，证明附加的作用项并不破坏原始 Hamilton 量的 Hermite 性.

解 (1) $a^\mu_\nu\gamma^\mu=S^{-1}\gamma^\mu S$，故

$$S^{-1}\gamma_\mu S a^\mu_\nu=\gamma_\nu$$

由 $F^{\alpha\beta}=a^\alpha_\mu a^\beta_\nu F^{\mu\nu}$，$\psi'(x')=S\psi(x)$,有

$$\sigma'_{\alpha\beta}F'^{\alpha\beta}\psi'(x')=\sigma'_{\alpha\beta}F'^{\alpha\beta}S\psi(x)=\frac{i}{2}[\gamma_\alpha\gamma_\beta-\gamma_\beta\gamma_\alpha]a^\alpha_\mu a^\beta_\nu F^{\mu\nu}S\psi(x)$$
$$=S\frac{i}{2}[S^{-1}\gamma_\alpha S a^\alpha_\mu\cdot S^{-1}\gamma_\beta S a^\beta_\nu-S^{-1}\gamma_\beta S a^\beta_\nu S^{-1}\gamma_\alpha S a^\alpha_\mu]F^{\mu\nu}\psi(x)$$
$$=S\frac{i}{2}[\gamma_\mu\gamma_\nu-\gamma_\nu\gamma_\mu]F^{\mu\nu}\psi(x)=S\sigma_{\mu\nu}F^{\mu\nu}\psi(x)$$

所以

$$S^{-1}\sigma'_{\alpha\beta}F'^{\alpha\beta}\psi'(x')=\sigma_{\mu\nu}F^{\mu\nu}\psi(x)$$

即方程仍为协变的.

(2) 利用 $i\nabla\!\!\!/=i\gamma_0\dfrac{\partial}{\partial t}+i\gamma\cdot\nabla=i\beta\dfrac{\partial}{\partial t}+i\gamma\cdot\nabla$

$$A\!\!\!/=\gamma^0A^0-\gamma\cdot A=\beta A^0-\gamma\cdot A$$

有

$$i\beta\frac{\partial}{\partial t}\psi=\left(-i\gamma\cdot\nabla+e\beta A^0-e\gamma\cdot A-K\frac{e}{4m}\sigma_{\mu\nu}F^{\mu\nu}+m\right)\psi$$

两边同乘β(左乘)

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi=\left[-i\alpha\cdot\nabla+eA^0-e\alpha\cdot A-K\frac{e}{4m}\beta\sigma_{\mu\nu}F^{\mu\nu}+m\beta\right]\psi$$

所以

$$H=-i\alpha\cdot\nabla+eA^0-e\alpha\cdot A-K\frac{e}{4m}\beta\sigma_{\mu\nu}F^{\mu\nu}+m\beta$$

其中

$$\alpha=\begin{pmatrix}0 & \sigma\\ \sigma & 0\end{pmatrix}$$

由于在这一γ表示中，γ_i反 Hermite，γ_0Hermite 所以σ_{ij}Hermite，而σ_{oi}反 Hermite. 利用β与γ_i的反对易关系易证

$$[\beta,\ \sigma_{ij}]=0$$

$$\{\beta,\ \sigma_{oi}\}=0$$

于是附加相互作用项的 Hermite 共轭是

$$\left(-K\frac{e}{4m}\beta\sigma_{\mu\nu}F^{\mu\nu}\right)^{\dagger}=-K^*\frac{e^*}{4m^*}\sigma_{\mu\nu}^{\dagger}\beta^{\dagger}F^{\mu\nu *}=-K\frac{e}{4m}\beta\sigma_{\mu\nu}F^{\mu\nu}$$

即它是 Hermite 的，因而不破坏H的 Hermite 性，这里用到了K，e，m和$F^{\mu\nu}$的实数性质.

11.38 同位旋矢量算符的性质及多核子系统的能量本征态与本征值

题 11.38 质子和中子可视为一个粒子-核子的两个自旋态. 用$|+\rangle$和$|-\rangle$分别表示质子和中子. 定义下列算符

$$t_3|\pm\rangle=\pm\frac{1}{2}|\pm\rangle$$

$$t_{\pm}|\mp\rangle=|\pm\rangle$$

$$t_{\mp}|\mp\rangle=0$$

算符$t_1=\frac{1}{2}(t_++t_-)$，$t_2=-\frac{i}{2}(t_+-t_-)$和$t_3$可以用$\frac{1}{2}$乘$2\times2$ Pauli 矩阵表示. 它们形成同位旋空间中的矢量t. 作为简单模型，N个核子处于全同的空间态时的 Hamilton 量可写成下列三项和

$$H=NE_0+c_1\sum_{i>j}t_i\cdot t_j+c_2Q^2$$

式中E_0，c_1和c_2是正常数且$c_1>c_2$. t_i是第i核子的同位旋，Q是以e为单位的总电量. 对所有核子对求和. (1) 证明$\sum\limits_{i>j}t_i\cdot t_j=\frac{1}{2}\left[T(T+1)-\frac{3}{4}N\right]$，$T$是系统总同位旋量子数. 在本题以下部分需注意中子和质子都是自旋$\frac{1}{2}$的 Fermi 子. (2) 两核子系统的能量本征态和本征值如何？各态总自旋如何？(3) 四核子系统能量本征值，本征态如何？(4) 三核子系统的能量本征值如何？

解 (1)

$$\sum_{i>j} t_i \cdot t_j = \frac{1}{2}\left[\left(\sum_{i=1}^{N} t_i\right)^2 - \sum_{i=1}^{N} t_i^2\right] = \frac{1}{2}\left(T(T+1) - \frac{3}{4}N\right)$$

(2) 两核子系统如下表：

组合	同位旋态	自旋态
(p, p)	$\lvert+\rangle\lvert+\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\lvert\alpha\rangle\lvert\beta\rangle - \lvert\beta\rangle\lvert\alpha\rangle)$
(n, n)	$\lvert-\rangle\lvert-\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\lvert\alpha\rangle\lvert\beta\rangle - \lvert\beta\rangle\lvert\alpha\rangle)$
(p, n)	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\lvert+\rangle\lvert-\rangle + \lvert-\rangle\lvert+\rangle)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\lvert\alpha\rangle\lvert\beta\rangle - \lvert\beta\rangle\lvert\alpha\rangle)$
(p, n)	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\lvert+\rangle\lvert-\rangle - \lvert-\rangle\lvert+\rangle)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\lvert\alpha\rangle\lvert\beta\rangle + \lvert\beta\rangle\lvert\alpha\rangle)\lvert\alpha\rangle\lvert\alpha\rangle$或$\lvert\beta\rangle\lvert\beta\rangle$

组合	T	S	Q	E
(p, p)	1	0	2	$C_1 + 4C_2$
(n, n)	1	0	0	C_1
(p, n)	1	0	1	$C_1 + C_2$
(p, n)	0	1	1	C_2

表中$\lvert\alpha\rangle$，$\lvert\beta\rangle$表示自旋+及−的单粒子态，能量E中已省略了一部分$\left(2E_0 - \frac{3}{4}C_1\right)$.

(3) 四核子是相同空间态下 Pauli 原理允许的最大粒子数. 其组合必为$(pnpn)$，且两个中子及质子自旋态各自不同. 相应于$(pnpn)$顺次排列的自旋态有四种：

$$(\alpha\alpha\beta\beta),\ (\beta\beta\alpha\alpha),\ (\alpha\beta\beta\alpha)\text{和}(\beta\alpha\alpha\beta)$$

对其他顺次可类推. 值得注意，这时总波函数已不能写成自旋部分和同位旋部分的简单直积并使之各自对称或反对称. 对系统可能的同位旋取值：$T=2$，1，0 相应可能的能量为

$$E = 4E_0 + 4c_2 + \frac{3}{2}c_1,\qquad 4E_0 + 4c_2 - \frac{1}{2}c_1,\qquad 4E_0 + 4c_2 - \frac{3}{2}c_1$$

但由于这 4 个核子空间波函数相同，而核子的自旋态只有两种，按 Pauli 原理，系统总同位旋只能取 0，相应能量只能取本征态为

$$\psi(1,\ 2,\ 3,\ 4) = \begin{vmatrix} \lvert+\rangle_1\alpha_1 & \lvert+\rangle_1\beta_1 & \lvert-\rangle_1\alpha_1 & \lvert-\rangle_1\beta_1 \\ \lvert+\rangle_2\alpha_2 & \lvert+\rangle_2\beta_2 & \lvert-\rangle_2\alpha_2 & \lvert-\rangle_2\beta_2 \\ \lvert+\rangle_3\alpha_3 & \lvert+\rangle_3\beta_3 & \lvert-\rangle_3\alpha_3 & \lvert-\rangle_3\beta_3 \\ \lvert+\rangle_4\alpha_4 & \lvert+\rangle_4\beta_4 & \lvert-\rangle_4\alpha_4 & \lvert-\rangle_4\beta_4 \end{vmatrix}$$

(4) 三核子系统的组态可为(ppn)或(nnp)，同位旋可为$\frac{3}{2}$或$\frac{1}{2}$，对(ppn)

$$E = 3E_0 + 4c_2 \pm \frac{3}{4}c_1$$

对(nnp)

$$E = 3E_0 + c_2 \pm \frac{3}{4} c_1$$

11.39　等边三角形分子俘获额外电子后的能量本征态及其性质

题 11.39　一个等边三角形分子可以俘获一个额外电子. 作为初级的近似，电子可以进入分别局域在三个顶角处的三个正交的态ψ_A，ψ_B，ψ_C中的任一个. 作为更好的近似，可以认为能量本征态是有效 Hamilton 量决定的ψ_A，ψ_B，ψ_C 的线性组合. 该有效 Hamilton 量在ψ_A，ψ_B，ψ_C态上有相同的期望值而在其中任两个之间有相同的矩阵元 V_0. (1) 旋转 $2\pi/3$ 的对称性对ψ_A，ψ_B，ψ_C的组合系数有什么限制？同时还存在交换 B 和 C 的对称性，这对有效 Hamilton 量的本征值有何限制？(2) $t = 0$ 时刻，电子被俘获进入ψ_A态，在时刻 t 电子仍处于ψ_A态的概率为多大？

解　(1) 在旋转 $2\pi/3$ 变换作用下，有

$$R\psi_A = a\psi_B, \qquad R\psi_B = a\psi_c, \qquad R\psi_c = a\psi_A$$

易知 $a=1$，$e^{i2\pi/3}$ 和 $e^{i4\pi/3}$. 设有效 Hamilton 量 H 的本征态为 $\psi = a_1\psi_A + a_2\psi_B + a_3\psi_C$，则由 $R_\psi = \psi$ 及 ψ_A、ψ_B、ψ_C 正交性可得

$$\begin{cases} a_1 a = a_2 \\ a_2 a = a_3 \\ a_3 a = a_1 \end{cases}$$

于是有三种组合(在基ψ_A、ψ_B、ψ_C中，分别对应 α 的三个数值)

$$\psi^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix}1\\1\\1\end{pmatrix}, \qquad \psi^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix}1\\ e^{i2\pi/3}\\ e^{i4\pi/3}\end{pmatrix} \psi^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix}e^{-i4\pi/3}\\ 1\\ e^{i4\pi/3}\end{pmatrix}$$

取有效 Hamilton 量的对角元为 0，则

$$H = \begin{pmatrix} 0 & V & V \\ V & 0 & V \\ V & V & 0 \end{pmatrix}$$

与$\psi^{(1)}$，$\psi^{(2)}$，$\psi^{(3)}$ 相应的能量是 $2V$，$-V$，$-V$.

至于交换两个原子的对称变换 p，由于 p 与 R 不对易，故 p 在上面选定的 H 与 R 的本征态$\psi^{(1)}$，$\psi^{(2)}$，$\psi^{(3)}$下不是对角的，但$\psi^{(1)}$是 p 的本征态，而$\psi^{(2)}$，$\psi^{(3)}$虽不是 p 本征态但已简并，p 对 H 的本征值无限制.

(2) 展开 $t=0$ 时刻波函数ψ_A

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{3}}\left[\psi^{(1)} + \psi^{(2)} + e^{-i2\pi/3}\psi^{(3)}\right]$$

经 t 时间后发展成

$$\psi(t) = \frac{1}{\sqrt{3}}\left[e^{-i2Vt/\hbar}\psi^{(1)} + e^{+iVt/\hbar}\psi^{(2)} + e^{-i2\pi/3}e^{+iVt/\hbar}\psi^{(3)}\right]$$

$$\left|\langle\psi_A|\psi(t)\rangle\right|^2 = \frac{1}{9}\left(5 + 4\cos\frac{3Vt}{\hbar}\right)$$

11.40 用变分法求分子的基态能量及动能、势能的平均值

题 11.40 分子的能量是电子的核的动能及各种 Coulomb 能的和. 假定一个特定的多体归一化波函数$\psi(x_1, \cdots, x_N)$，其动能及势能的平均值是 T 和 $U(U>0)$. (1) 用试探波函数$\lambda^{3N/2}\psi(\lambda x_1, \cdots, \lambda x_N)$做基态能量的变分估计，这里$\lambda$是参数. (2) 假定$\psi$是真实的基态波函数并且真正的基态能量是$-B$ ($B>0$)，求 T 和 U 的值.

解 (1) 动能和 Coulomb 势能都是 x 的齐次函数. 在试探波函数$\lambda^{3N/2}\psi(\lambda x_1, \cdots, \lambda x_N)$下的平均值分别是$\lambda^2 T$ 和$-\lambda U$，因而能量平均值为

$$E(\lambda)=\lambda^2 T-\lambda U$$

基态$\dfrac{\mathrm{d}E(\lambda)}{\mathrm{d}\lambda}=0$，有$\lambda=\dfrac{U}{2T}$从而基态能量的变分估计值为

$$E=-\frac{U^2}{4T}$$

(2) 由于$\lambda=1$是基态，从而$U=2T$，$E=-T$，所以

$$T=B, \qquad U=2B$$

11.41 绝热近似下的双原子分子的本征函数与本征值

题 11.41 双原分子中，质子运动通常比电子运动慢得多，对此可以用绝热近似. 这个近似假定电子波函数由质子的瞬时位置决定. 氢分子离子的高度理想化模型由下面一维 Hamilton 量给出

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}-g\delta(x-x_0)-g\delta(x+x_0)$$

式中$\pm x_0$是质子的坐标. (1) 任意 x_0所决定的所有本征值和本征函数如何？你可以用一个超越方程表示该本征值. 对两种情形$\dfrac{mgx_0}{\hbar^2}\gg 1$和$\dfrac{mgx_0}{\hbar^2}\ll 1$给出解析结果. (2) 假定质子($M\gg m$)绝热运动并有排斥势 $V(2x_0)=g/200x_0$作用于其间，近似计算质子的平衡距离. (3) 近似计算质子在平衡位置附近作谐振动的频率. 绝热近似成立吗？

解 H空间反演不变，其本征态可分为奇偶宇称两大类

$$\text{奇宇称} \qquad \psi(x)=\begin{cases}\sinh(kx), & 0<x\leqslant x_0\\ a\mathrm{e}^{-kx}, & x_0\leqslant x\end{cases}$$

$$\text{偶宇称} \qquad \psi(x)=\begin{cases}\cosh(kx), & 0\leqslant x\leqslant x_0\\ b\mathrm{e}^{-kx}, & x_0\leqslant x\end{cases}$$

由 x_0处连续条件

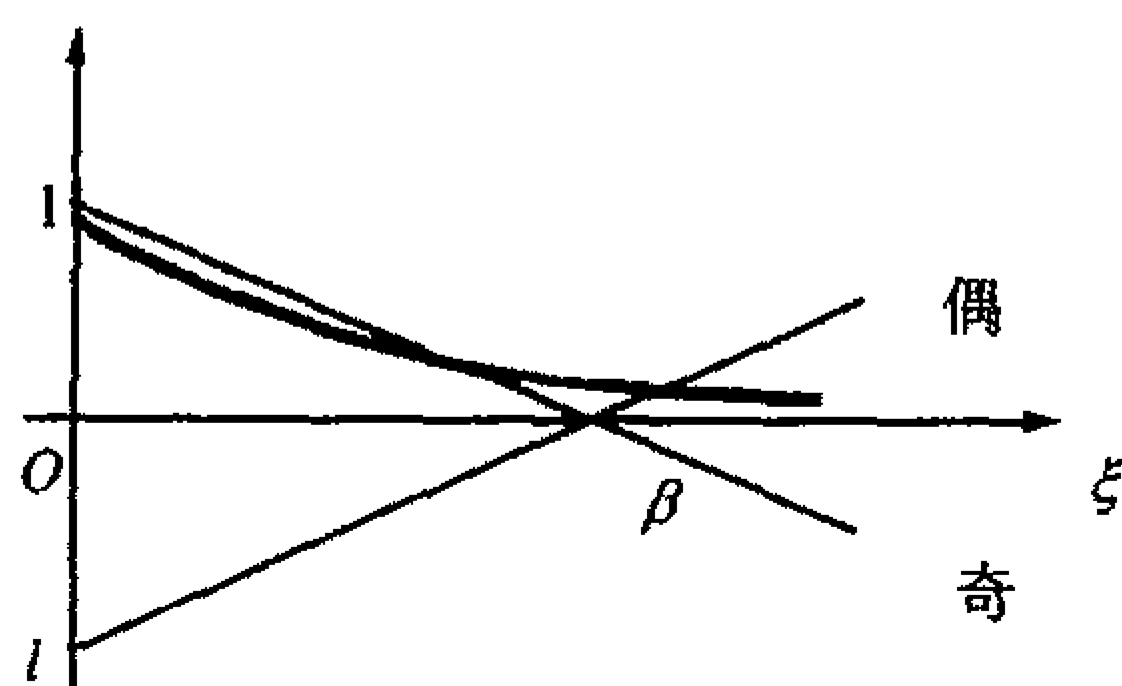
$$\begin{cases}\psi(x_0+\varepsilon)=\psi(x_0-\varepsilon)\\ \psi'(x_0+\varepsilon)-\psi'(x_0-\varepsilon)+\beta\psi(x_0)=0, \qquad \beta=\dfrac{2mg}{\hbar^2}\end{cases}$$

得到

$$\text{奇宇称}\qquad e^{-2kx_0}=1-\frac{2kx_0}{\beta x_0}$$

$$\text{偶宇称}\qquad e^{-2kx_0}=-1+\frac{2kx_0}{\beta x_0}$$

如题图 11.41 所示，当 $\beta x_0 \ll 1$ 时，仅偶宇称有解 $k=\beta$，更高一级



题图 11.41

$$k=\beta(1-\beta x_0)$$

$$E=-\frac{\hbar^2\beta^2}{2m}\cdot(1-\beta x_0)^2$$

当 $\beta x_0 \gg 1$ 时，迭代得到近似解

$$k=\frac{\beta}{2}(1\mp e^{-\beta x_0})$$

$$E=-\frac{\hbar^2\beta^2}{8m}(1\mp e^{-\beta x_0})^2$$

式中 $\mp$ 号对应于偶、奇宇称解. 值得注意，对奇宇称

$$E=-\frac{\hbar^2\beta^2}{8m}(1-e^{-\beta x_0})^2$$

当 x_0 增大时下降，即使不考虑质子的斥力也已使系统不稳定，故不是束缚态解. 本题只有两种极限情况下的偶宇称解.

(2) 质子能量系统的总能量为

$$\langle H\rangle=E_e+T_p+V_p$$

若采用绝热近似忽略质子动能 T_p，代入 $V_p=g/200x_0$，对 $\beta x_0 \ll 1$ 情形

$$E_e=-\frac{\hbar^2\beta^2}{2m}(1-\beta x_0)^2$$

由 $\frac{d}{dx}\langle H\rangle\big|_{\bar{x}_0}=0$，得

$$(\beta\bar{x}_0)^2(1-\beta\bar{x}_0)=\frac{1}{400}$$

进而可得

$$\beta\bar{x}_0\sim\frac{1}{20},\qquad \bar{x}_0\sim\frac{1}{20\beta}$$

对 $\beta x_0 \gg 1$ 情形

$$E_e=-\frac{\hbar^2\beta^2}{8m}(1+e^{-\beta\bar{x}_0})^2$$

由 $\frac{d}{dx_0}\langle H\rangle\big|_{\bar{x}_0}=0$，得

$$\frac{1}{2}\cdot\frac{\hbar^2}{2mg}\beta^3(1+e^{-\beta\bar{x}_0})e^{-\beta\bar{x}}-\frac{1}{200\bar{x}_0^{\,2}}=0$$

$$100(\beta\bar{x}_0)^2=e^{\beta\bar{x}_0},\qquad \beta\bar{x}_0\gg 1$$

此时

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x_0^2}\langle H\rangle\Big|_{\bar{x}_0} = -\frac{g}{2}\beta^3\mathrm{e}^{-\beta\bar{x}_0} + \frac{g}{100\bar{x}_0^3} = -\frac{g}{2\bar{x}_0^3}(\beta x - 2) < 0$$

即此极值点是极大点，不稳定.

(3) 对 $\beta x_0 \ll 1$ 情形，求得简谐振动的弹性系数 K 为

$$K = \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\langle H\rangle\Big|_{\bar{x}_0} = -\frac{\hbar^2}{m}\beta^4 + \frac{g}{100\bar{x}_0^3} \sim 40g\beta^3$$

由此极易求得振动频率.

另外，质子动能 $\sim \frac{1}{2}K(\Delta x)^2 \ll g\beta$，电子动能 $\sim -\frac{\hbar^2\beta^2}{2m} \sim -\beta g$，故绝热近似成立.

11.42 用 Schwarz 不等式证明不确定性原理，并证明最小不确定性态是 Gauss 函数

题 11.42 (1) 考虑积分 $I = \int(\lambda f + g)^*(\lambda f + g)\mathrm{d}v$，这里 f, g 是一般的位置函数，λ 是实常数，证明

$$\int f^* f\mathrm{d}v \int g^* g\mathrm{d}v \geqslant \frac{1}{4}\left[\int (f^* g + g^* f)\mathrm{d}v\right]^2$$

上式称为 Schwarz 不等式. (2) 设 A，B 是两个可观察量的算符，利用下式

$$f = (A - \bar{A})\psi \qquad \text{和 } g = \mathrm{i}(B - \bar{B})\psi$$

(其中 $\bar{A}, \bar{B}$ 是 A，B 在态 ψ 中的平均值)证明

$$(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geqslant -\frac{1}{4}\left[\int \psi^*(AB - BA)\psi dv\right]^2$$

式中 ΔA，ΔB 为 A 与 B 的不确定度. (3) 证明 $\Delta p_x \Delta x \geqslant \hbar/2$. (4) 证明若 $\Delta p_x \Delta x = \hbar/2$，那么 ψ 是 Gauss 函数.

证明 (1) 令

$$u = \int f^* f\mathrm{d}v, \qquad v = \int f^* g\mathrm{d}v, \qquad w = \int g^* g\mathrm{d}v$$

则有

$$I = \int(\lambda f + g)^*(\lambda f + g)\mathrm{d}v = u\lambda^2 + (v + v^*)\lambda + w \tag{1}$$

因为式(1)中被积函数处处只能大于或等于零，所以

$$u\lambda^2 + (v + v^*)\lambda + w \geqslant 0 \tag{2}$$

式(2)为实变量的一元二次不等式，满足的条件是

$$4uw \geqslant (v + v^*)^2$$

即

$$\int f^* f\mathrm{d}v \int g^* g\mathrm{d}v \geqslant \frac{1}{4}\left[\int (f^* g + g^* f)\mathrm{d}v\right]^2 \tag{3}$$

(2) 令 $f = (A - \bar{A})\psi$, $g = (B - \bar{B})\psi$ 代入式(3)左边，有

$$\int\left[(A-\bar{A})\psi\right]^*(A-\bar{A})\psi\mathrm{d}v\int\left[\mathrm{i}(B-\bar{B})\psi\right]^*\mathrm{i}(B-\bar{B})\psi\mathrm{d}v$$
$$=\int\psi^*(A-\bar{A})\psi\mathrm{d}v\int\psi^*(B-\bar{B})\psi\mathrm{d}v \tag{4}$$
$$=(\Delta A)^2(\Delta B)^2$$

在上面第二步中用到 A，B 是 Hermite 算符. 这时易算出式(3)的右边为

$$-\frac{1}{4}\int\psi^*(AB-BA)\psi\mathrm{d}v \tag{5}$$

将式(4)，式(5)代入式(3)，有

$$(\Delta A)^2(\Delta B)^2\geqslant-\frac{1}{4}\overline{[A,B]} \tag{6}$$

(3) 令 $A=\frac{\hbar}{i}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$， $B=x$ 有

$$[A,B]=\frac{\hbar}{i}$$

代入式(6)，有

$$(\Delta p_x)^2(\Delta x)^2\geqslant-\frac{1}{4}(\hbar/\mathrm{i})^2\int\psi^*\psi\mathrm{d}v=\frac{1}{4}\hbar^2$$

即

$$\Delta p_x\Delta x\geqslant\hbar/2 \tag{7}$$

(4) 令 $\bar{p}_x=\bar{x}=0$，这不影响所求的结果，则有

$$f=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x},\qquad g=\mathrm{i}x\psi$$

式(7)中的等号只有在 $\lambda f+g=0$ 对所有的 x 都成立的情况下才是对的(其中 λ 为实常数)，所以条件成立时有

$$\lambda\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\cdot\frac{\partial\psi}{\partial x}=-\mathrm{i}x\psi$$

即

$$\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}=\frac{1}{\lambda\hbar}x\psi \tag{8}$$

式(8)解为

$$\psi=C\exp(-x^2/4\Delta^2)$$

式中 C 是常数，Δ^2 满足

$$\Delta^2=-\lambda\hbar/2$$

尚有一个解 $\psi=C\exp(x^2/4\Delta^2)$ 因为 $x\to\infty$ 时，趋于无限而略去，这里 λ 应是负实数.

11.43　热平衡中的一维谐振子(混态)的位置概率函数

题 11.43　处于温度为 T 的热平衡中的一维谐振子的位置概率函数是 $f(x)=\frac{1}{Z}\sum_n\exp(-E_n/k_BT)u_n{}^2(x)$，这里 u_n 是量子数为 n 的能量本征态，相应本征值为 E_n，

$Z=\sum_n \exp(-E_n/k_BT)$. 设 $f(x)\mathrm{d}x$ 为在 $x\sim x+\mathrm{d}x$ 间发现粒子的概率，这些粒子处于热平衡系统中，是处于混态，在混态中不同 $|n\rangle$ 态前的加权因子是 Boltzmann 常量因子. 证明：(1)

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}=\frac{1}{Z}\left(\frac{2m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}\exp\left(\frac{-E_n}{k_BT}\right)\left(\sqrt{n}\,u_{n-1}u_n-\sqrt{n+1}\,u_nu_{n+1}\right)$$

$$xf=\frac{1}{Z}\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2}\exp\left(\frac{-E_n}{k_BT}\right)\left(\sqrt{n}\,u_{n-1}u_n+\sqrt{n+1}\,u_nu_{n+1}\right)$$

式中 m 为质量，ω为角频率. (2) $f(x)=C\exp(-x^2/2\sigma^2)$，这里 $\sigma^2=(\hbar/2mw)\coth(\hbar w/2k_BT)$，$C$ 是常数. (3) 在高温极限 $(k_BT\gg\hbar w)$，$f(x)$ 趋向经典形式.

解 (1) 利用产生、湮灭算符

$$a=(2m\hbar\omega)^{-\frac{1}{2}}(m\omega x+\mathrm{i}p)$$

$$a^{\dagger}=(2m\hbar\omega)^{-\frac{1}{2}}(m\omega x-\mathrm{i}p)$$

可解出

$$x=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a+a^{\dagger}),\qquad P=\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\frac{(a-a^{\dagger})}{i}$$

同时可得到

$$au_n=\sqrt{n}\,u_{n-1},\qquad a^{\dagger}u_n=\sqrt{n+1}\,u_{n+1}$$

因为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}=\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(a-a^{\dagger})$$

所以

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}&=\frac{2}{Z}\sum_n\exp\left(\frac{-E_n}{k_BT}\right)u_n\frac{\mathrm{d}u_n}{\mathrm{d}x}\\&=\frac{1}{Z}\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\exp\left(\frac{-E_n}{k_BT}\right)u_n(au_n-a^{\dagger}u_n)\\&=\frac{1}{Z}\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\sum_n\exp\left(\frac{-E_n}{k_BT}\right)\left[\sqrt{n}\,u_nu_{n-1}-\sqrt{n+1}\,u_nu_{n+1}\right]\end{aligned}\tag{1}$$

类似有

$$\begin{aligned}xf&=\frac{1}{Z}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\sum_n\exp\left(-\frac{E_n}{k_BT}\right)u_n(au_n+a^{\dagger}u_n)\\&=\frac{1}{Z}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\sum_n\exp\left(-\frac{E_n}{k_BT}\right)\left(\sqrt{n}\,u_nu_{n-1}+\sqrt{n+1}\,u_nu_{n+1}\right)\end{aligned}$$

(2) 因为式(1)中前一项的求和可改写为

$$\sum_{n=1}\exp\left(-\frac{E_n}{k_BT}\right)\sqrt{n}\,u_nu_{n-1}=\sum_{m=0}\exp\left(-\frac{E_{m+1}}{k_BT}\right)x\sqrt{m+1}\,u_{m+1}u_m$$

所以式(1)可改写为

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} = -\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\left[1-\exp\left(\frac{-\hbar\omega}{k_\mathrm{B}T}\right)\right]S \tag{2}$$

式中

$$S = \frac{1}{Z}\sum_n \exp\left(-\frac{E_n}{k_\mathrm{B}T}\right)\sqrt{n+1}\, u_n u_{n+1}$$

类似有

$$xf = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left[1+\exp\left(\frac{-\hbar\omega}{k_\mathrm{B}T}\right)\right]S \tag{3}$$

比较式(2)，式(3)可知

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} = -\frac{1}{\sigma^2}xf \tag{4}$$

式中

$$\sigma^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}\left[\frac{1+\exp(-\hbar\omega/k_\mathrm{B}T)}{1-\exp(-\hbar\omega/k_\mathrm{B}T)}\right] = \frac{\hbar}{2m\omega}\coth\frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T}$$

式(4)的解为

$$f(x) = C\exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right)$$

式中 C 为常数，由归一条件确定

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\mathrm{d}x = 1$$

σ 是 $f(x)$ 的标准偏差，由式(4) 可知它随着温度 T 升高而增加.

(3) 当 $k_\mathrm{B}T \gg \hbar\omega$

$$\coth(\hbar\omega/2k_\mathrm{B}T) \to \frac{2k_\mathrm{B}T}{\hbar\omega}, \qquad 且\ \sigma^2 \to \frac{K_\mathrm{B}T}{m\omega^2}$$

这样导致

$$f(x) \to C\exp\left(-\frac{m\omega^2x^2}{2k_\mathrm{B}T}\right)$$

对于谐振子势中的粒子，其势能为

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

所以有

$$f(x) = C\exp\left(-\frac{V(x)}{k_\mathrm{B}T}\right)$$

这正是经典位置概率函数的表达式 Boltzmann 因子.

讨论　实际上处于温度 T 的热平衡系统的谐振子的密度矩阵为 $\rho = \sum_n \mathrm{e}^{-E_n/k_\mathrm{B}T}|n\rangle\langle n|/Z$. 其中 $|n\rangle$ 是能量本征值为 E_n 的本征态，$\langle n|$ 为 $|n\rangle$ 的共轭态

$$f(x)=\langle x|\rho|x\rangle=\frac{1}{Z}\sum_n \mathrm{e}^{-E_n/k_BT}|\langle x|n\rangle|^2=\frac{1}{Z}\sum_n \mathrm{e}^{-E_n/k_BT}u_n^{\ 2}$$

11.44 带电粒子在均匀磁场中运动时的产生、湮灭算符及能级

题 11.44 一个质量为 m，电量为 e 的粒子在沿 z 轴方向的均匀磁场 $\boldsymbol{B}$ 中，在 xy 平面内运动. (1) 给出的粒子的 Hamilton 量是 $H=\frac{1}{2m}(\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A})^2$，其中 $\boldsymbol{P}$ 是广义动量，$\boldsymbol{A}$ 是磁场的矢势，证明

$$H=\frac{1}{2m}\left[p_x^{\ 2}+p_y^{\ 2}+eB(yp_x-xp_y)+\frac{1}{4}e^2B^2(x^2+y^2)\right]$$

(2) 证明如下定义的算符

$$b=\frac{1}{\sqrt{2eB\hbar}}\left(\frac{1}{2}eBx+\mathrm{i}P_x+\frac{1}{2}\mathrm{i}eBy-P_y\right)$$

$$b^\dagger=\frac{1}{\sqrt{2eB\hbar}}\left(\frac{1}{2}eBx-\mathrm{i}px-\frac{1}{2}\mathrm{i}eBy-p_y\right)$$

满足下列关系式

$$bb^\dagger=\frac{H}{\hbar\omega}+\frac{1}{2},\qquad b^\dagger b=\frac{H}{\hbar\omega}-\frac{1}{2}$$

式中 $\omega=eB/m$.

(3) 由此证明粒子的能量为 $E=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$，式中 n 为正整数.

证明 (1) 令

$$A_x=-\frac{1}{2}By,\qquad A_y=\frac{1}{2}Bx,\qquad A_z=0 \tag{1}$$

则由 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$ 可得 $\boldsymbol{B}=B\boldsymbol{e}_z$，满足题意中的磁场要求.

由于 Hamilton 量是

$$H=\frac{1}{2m}(\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A})^2=\frac{1}{2m}(p^2-2e\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}+e^2A^2) \tag{2}$$

将式(1)代入式(2)，同时注意到粒子动量 $p_z=0$，这时有

$$H=\frac{1}{2m}\left[p_x^{\ 2}+p_y^{\ 2}+eB(yp_x-xp_y)+\frac{1}{4}e^2B^2(x^2+y^2)\right] \tag{3}$$

(2) 由 b, $b^\dagger$ 的定义有

$$\begin{aligned}bb^\dagger&=\frac{1}{2eB\hbar}\left(\frac{1}{2}eBx+\mathrm{i}p_x+\frac{1}{2}\mathrm{i}eBy-p_y\right)\times\left(\frac{1}{2}eBx-\mathrm{i}p_x-\frac{1}{2}\mathrm{i}eBy-p_y\right)\\&=\frac{1}{2eB\hbar}\left[\frac{1}{4}e^2B^2(x^2+y^2)+p_x^{\ 2}+p_y^{\ 2}+eB(yp_x-xp_y)+eB\hbar\right]\end{aligned} \tag{4}$$

上面最后一步用到了 $[px,x]=[p_y,y]=-i\hbar,[x\cdot y]=0$.

比较式(3)和式(4)，并注意到 $\omega=eB/m$，有

$$bb^{\dagger}=\frac{H}{\hbar w}+\frac{1}{2} \tag{5}$$

类似的推导可得

$$b^{\dagger}b=\frac{H}{\hbar w}-\frac{1}{2} \tag{6}$$

(3) 式(5)与式(6)相减，可得 b 与 $b^{\dagger}$ 的对易关系 $\left[b,b^{\dagger}\right]=1$，再由式(5)，式(6)相加可得

$$H=\frac{\hbar w}{2}\left(b^{\dagger}b+bb^{\dagger}\right)=\hbar w\left(b^{\dagger}b+\frac{1}{2}\right)$$

由此可知，b 和 $b^{\dagger}$ 同 Hamilton 量的关系与一维谐振子中的产生与湮灭算符 a 和 $a^{\dagger}$ 同 Hamilton 量的关系相同，这一相同的关系导致本题中粒子的能量为

$$E=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar w$$

11.45　相干态随时间的演化

题 11.45　设一个质量为 m，角频率为ω的一维谐振子在 t 为零时处于湮灭算符 a 的本征态，本征值为α，即有

$$a\psi(x,0)=\alpha\psi(x,0)$$

试证明：(1) $\psi(x,0)=C_0\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}u_n$，式中 u_n 是归一化的谐振子波函数(量子数为 n)，C_0 是归一化常数. (2) 在以后的 t 时刻，$\psi(x,t)$ 是 a 的本征值为 $\mu\exp(-\mathrm{i}\omega t)$ 的本征态. (3) 如果 $\alpha=\lambda\exp(\mathrm{i}\rho)$，这里$\lambda$，$\rho$为实数，则有

$$|\psi(x,t)|^2=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\exp\left[-(x-x_0)^2/2\sigma^2\right]$$

式中，$x_0=2\sigma\lambda\cos(\rho-wt)$, $\sigma^2=\hbar/2mw$. (4) 画出不同时刻$|\psi(x,t)|^2$的草图.

解　(1) 如果有

$$a\psi(x,0)=\alpha\psi(x,0)$$

设 $\psi(x,0)=\sum_{n=0}^{\infty}C_n u_n$，考虑到 $au_n=\sqrt{n}\,u_{n-1}$，有

$$a\sum_{n=0}^{\infty}C_n u_n=\sum_{n=0}^{\infty}C_n\sqrt{n}\,u_{n-1}=\alpha\sum_{n=0}^{\infty}C_n u_n \tag{1}$$

由式(1)可知

$$C_1=\alpha C_0,\qquad C_2=\frac{\alpha}{\sqrt{2}}C_1=\frac{\alpha^2}{\sqrt{2!}}C_0,\qquad C_3=\frac{\alpha}{\sqrt{3}}C_2=\frac{\alpha^3}{\sqrt{3!}}C_0$$

这样，易看出

$$C_n=\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}C_0$$

于是有

$$\psi(x,0)=C_0\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}u_n \tag{2}$$

(2) 在谐振子 Hamilton 量作用下，有

$$\begin{aligned}\psi(x,t)&=C_0\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}u_n\exp(-\mathrm{i}E_nt/\hbar)=C_0\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}u_n\exp\left[-\mathrm{i}\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega t\right]\\&=C_0\exp\left(-\frac{1}{2}\mathrm{i}\omega t\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\left[\alpha\exp(-\mathrm{i}\omega t)\right]^n}{\sqrt{n!}}u_n\end{aligned} \tag{3}$$

比较式(2)和式(3)，可见，$\psi(x,t)$ 与 $\psi(x,0)$ 除一个相因子外，区别只在于由 $\alpha\exp(-\mathrm{i}wt)$ 替代了 α，由此可知 $\psi(x,t)$ 应为 a 的本征值为 $\alpha\exp(-\mathrm{i}wt)$ 的本征态.

(3) 因为由定义有

$$a=\frac{1}{\sqrt{2m\hbar w}}(mwx+\mathrm{i}px)=\frac{1}{2\sigma}x+\sigma\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \tag{4}$$

式中 $\sigma^2=\hbar/2m\omega$，设 $\psi=\psi(x,t)$，有

$$a\psi(x,t)=\beta\psi(x,t) \tag{5}$$

这里

$$\beta=\alpha\exp(-\mathrm{i}wt)=\lambda\exp(\mathrm{i}\theta),\qquad \theta=\rho-wt$$

将式(4)代入式(5)，有

$$\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}=\frac{\beta}{\sigma}\psi-\frac{x}{2\sigma^2}\psi \tag{6}$$

式(6)的解为

$$\psi=C\exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma^2}+\frac{\beta}{\sigma}x\right) \tag{7}$$

式中 C 是与 x 无关的量. 取式(7) 的模方，有

$$|\psi|^2=|c|^2\exp(-G) \tag{8}$$

式中

$$\begin{aligned}G&=\frac{x^2}{2\sigma^2}-\frac{x}{\sigma}\left(\beta+\beta^*\right)=\frac{x^2}{2\sigma^2}-\frac{2\lambda x}{\sigma}\cos\theta\\&=\frac{1}{2\sigma^2}(x-2\sigma\lambda\cos\theta)^2-2\lambda^2\cos^2\theta\end{aligned} \tag{9}$$

令

$$x_0=2\sigma\lambda\cos\theta=2\sigma\lambda\cos(\rho-wt) \tag{10}$$

由式(8)，式(9)，式(10)，可得

$$|\psi|^2=|c|^2\exp(2\lambda^2\cos^2\theta)\exp\left[-(x-x_0)^2/\left(2\sigma^2\right)\right] \tag{11}$$

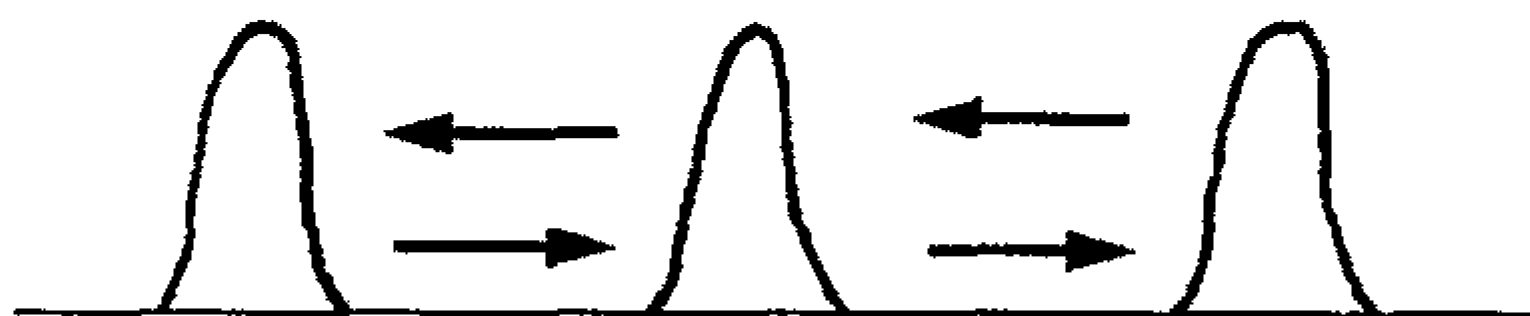
由归一条件可得

$$|c|^2\exp(2\lambda^2\cos^2\theta)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}$$

代入式(11)，有

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\exp\left[-(x-x_0)^2/(2\sigma^2)\right] \tag{12}$$

(4) 由式(10)和式(12)可知，$|\psi(x,t)|^2$是 Gauss 函数，它以不变化的形状作简谐运动，它的标准偏差即函数宽度是σ，运动振幅为$2\sigma\lambda$（λ是本征值振幅），运动草图如题图 11.45.



题图 11.45

11.46 求 N 个离子组成的环在自旋相互作用下的本征态与本征能量

题 11.46 考虑一个由 N 个离子组成的环，每个离子的自旋为$\frac{1}{2}$，间隔相等. 相邻离子受到$H=-\frac{1}{2}J\sum_{i=1}^{N}\sigma_i\cdot\sigma_{i+1}$的作用，式中$\sigma_i$是第 i 个离子的 Pauli 自旋算符(任一离子被选为 1)，J 是常数. 同时存在一个垂直于环的弱磁场，所以σ_z有两个本征函数α和β，系统的基态x_0相应于所有自旋态都是α态. x_j态代表除了第j个离子处在β态,其余态都处在α态. 试证明：(1) $\sigma_i\cdot\sigma_{i+1}\chi_j=\chi_j \quad j\neq i$ 或 $j\neq i+1$

$$\sigma_i\cdot\sigma_{i+1}\chi_i = 2\chi_{i+1}-\chi_i$$

$$\sigma_i\cdot\sigma_{i+1}\chi_{i+1} = 2\chi_i-\chi_{i+1}$$

(2) 若$\chi=\sum C_n\chi_n$是 H 本征值为 E 的本征态，则有

$$(E-E_0)C_n = J(2C_n - C_{n+1} - C_{n-1})$$

这里$E_0=-\frac{1}{2}JN$. (3) 若$C_n=\left(1/\sqrt{N}\right)\exp(\mathrm{i}qna)$，这里 a 为离子间距离，那么

$$E-E_0 = 2J(1-\cos qa)$$

解 (1) χ_j可写成直积态

$$\chi_j = \alpha_1\alpha_2\alpha_3\cdots\alpha\beta_j\alpha\cdots\alpha_{N-1}\alpha_N$$

算符$\boldsymbol{\sigma}_i\cdot\boldsymbol{\sigma}_{i+1}$用其 x，y，z 分量表示有

$$\boldsymbol{\sigma}_i\cdot\boldsymbol{\sigma}_{i+1} = \sigma_{ix}\sigma_{i+1,x}+\sigma_{iy}\sigma_{i+1,y}+\sigma_{iz,i+1,z}$$

又因为$\sigma_{ix},\sigma_{iy},\sigma_{iz}$只作用在$\alpha_i$态上，对$\alpha_j(j\neq i)$不作用，且

$$\sigma_{ix}\alpha_i=\beta_i \qquad \sigma_{iy}\alpha_i=-i\beta_i \qquad \sigma_{iz}\alpha_i=-\alpha_i$$

$$\sigma_{iz}\beta_i=+\beta_i \qquad \sigma_{iy}\beta_i=i\alpha_i$$

所以有

$$(\sigma_{ix}\sigma_{i+1,x}+\sigma_{iy}\sigma_{i+1,y}+\sigma_{iz}\sigma_{i+1,z})\alpha_i\alpha_{i+1} = (\beta_i\beta_{i+1}-\beta_i\beta_{i+1}+\alpha_i\alpha_{i+1}) = \alpha_i\alpha_{i+1}$$

这样就有

$$\boldsymbol{\sigma}_i\cdot\boldsymbol{\sigma}_{i+1}\chi_j = \chi_j$$

又因为

$$(\sigma_{ix}\sigma_{i+1,x}+\sigma_{iy}\sigma_{i+1,y}+\sigma_{iz}\sigma_{i+1,z})\beta_i\alpha_{i+1}=\alpha_i\beta_{i+1}+\alpha_i\beta_{i+1}-\beta_i\alpha_{i+1}$$

所以当 $j=i$ 时，有

$$\boldsymbol{\sigma}_i\cdot\boldsymbol{\sigma}_{i+1}\chi_i=2\chi_{i+1}-\chi_i \tag{1}$$

同理，$j=i+1$ 时有

$$\boldsymbol{\sigma}_i\cdot\boldsymbol{\sigma}_{i+1}\chi_{i+1}=2\chi_i-\chi_{i+1} \tag{2}$$

(2) 由于 $\left(\sum\limits_{i=1}^{N}\boldsymbol{\sigma}_i\cdot\boldsymbol{\sigma}_{i+1}\right)\chi_n$ 中有 $N-2$ 项是 i 或 $i+1$ 都不等于 n，这时圆括号内算符作用到 χ_n 上仍为 χ_n. 只有两项 $n=i$ 和 $n=i+1$ 的项作用后改变，由式(1)，式(2)可知

$$\left(\sum_{i=1}^{N}\sigma_i\cdot\sigma_{i+1}\right)\chi_n=N\chi_n+2(\chi_{n-1}+\chi_{n+1}-2\chi_n)$$

因此，有

$$\begin{aligned}H\chi&=-\frac{1}{2}J\left(\sum_{i=1}^{N}\sigma_i\cdot\sigma_{i+1}\right)\sum_{n=1}^{N}C_n\chi_n\\&=-\frac{1}{2}JN\sum_{n=1}^{N}C_n\chi_n+J\sum_{n=1}^{N}C_n\left(2\chi_n-\chi_{n-1}-\chi_{n+1}\right)\\&=E\sum_{n=1}^{N}C_n\chi_n\end{aligned} \tag{3}$$

由式(1) χ_n 前的系数相等可得

$$(E-E_0)C_n=J(2C_n-C_{n+1}-C_{n-1}) \tag{4}$$

(3) 若令

$$C_n=\frac{1}{\sqrt{N}}\exp(\mathrm{i}qna)$$

则

$$C_{n+1}=\exp(\mathrm{i}qa)C_n,\qquad C_{n-1}=\exp(-\mathrm{i}qa)C_n \tag{5}$$

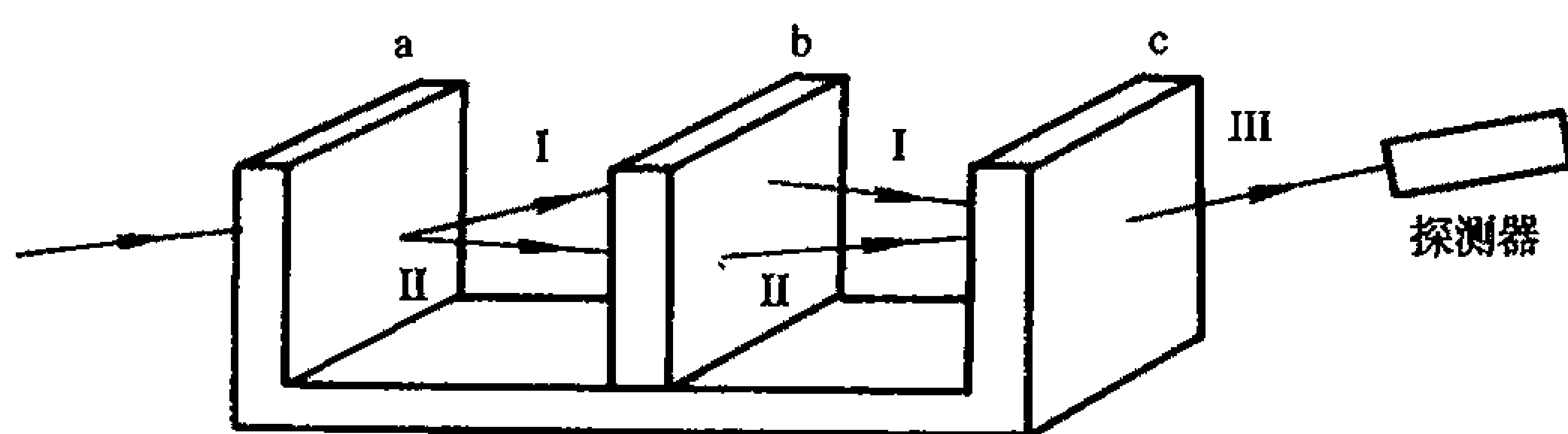
将式(5)代入式(4)，有

$$(E-E_0)=2J(1-\cos qa)$$

11.47 中子干涉仪中最终干涉强度与其中一路磁场的关系

题 11.47 中子干涉仪将一束单色热中子束分裂为径空间不同路径的两束，最后再会合到一起相干叠加(题图 11.47(a)). 在两条途径之一加上磁场，磁场会使中子自旋方向发生转动. 仪器的设置使得在重新会合前，两束中子具有相等的强度，在没加磁场时两路具有等长的有效距离. 取 x，y，z 为 Descartes 坐标，设 α，β 为 σ_z 的本征态. (1) 设入射中子束处于 α 态，常磁场 $\boldsymbol{B}$ 沿 x 轴方向加在其中一路上，证明经过时间 $t=\pi\hbar/2\mu_n B$(μ_n 是中子磁偶极矩)后这一路中子的自旋被颠倒. (2) 自旋同样可以由沿 y 轴方向的 $\boldsymbol{B}$(同样强度)经过同样的时间来反转. 在这两种情况下，中子经过磁场后中子的自旋波函数有无区别？在两种条件下，最终叠加后的自旋方向是什么？(3) 若磁场沿 x 轴经过① $t=\pi\hbar/\mu_n B$；② $t=2\pi\hbar/\mu_n B$，其他条件都相同，在每种情况下，经过磁场的那束中子的自旋方向怎样？最终干涉强度有

区别吗?



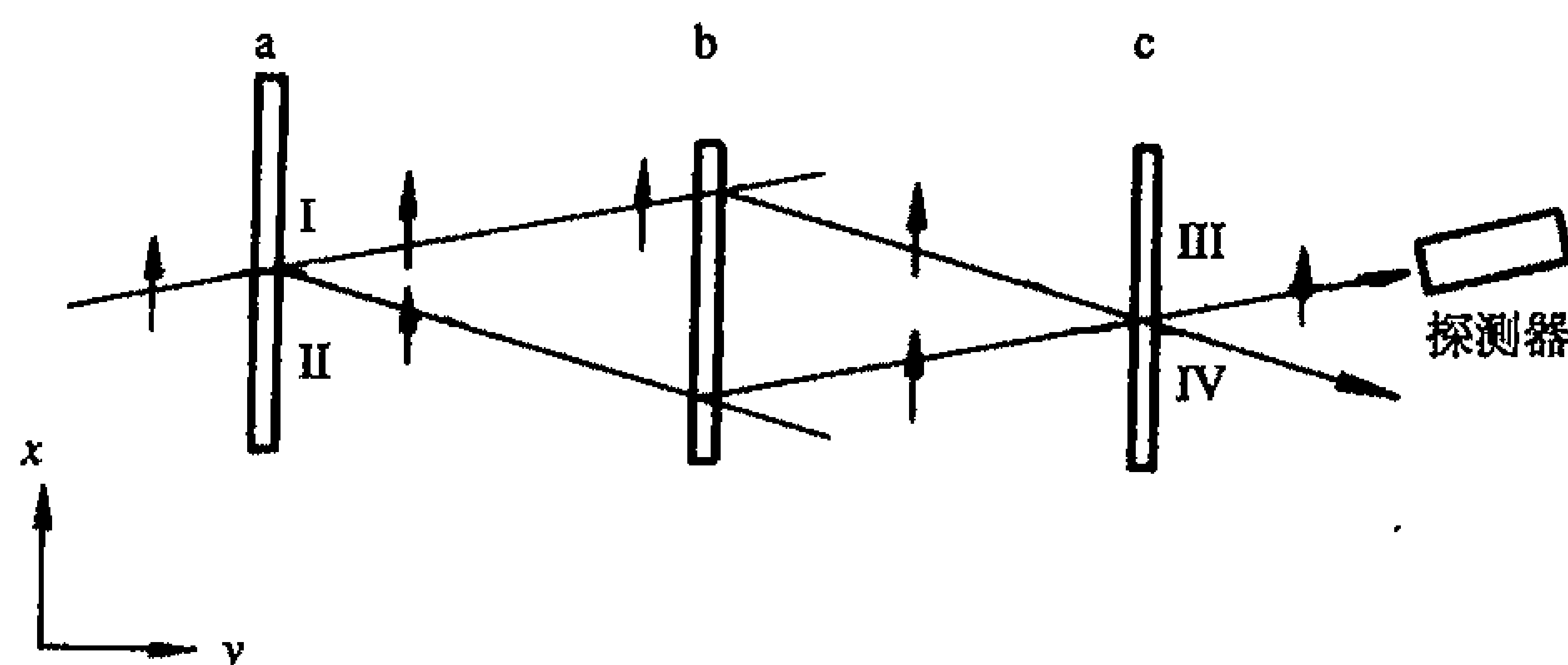
题图 11.47(a)

解 (1) 在题图 11.47(b)中标有无磁场时中子束自旋的方向. 因为磁场沿 x 轴方向，故磁场引起的 Hamilton 量 $H=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}=-\mu_n B$，其中 $\boldsymbol{\mu}$ 为中子磁矩，μ_n 为磁矩的 x 分量. 因此 σ_x 的本征态

$$\frac{(\alpha+\beta)}{\sqrt{2}},\qquad \frac{(\alpha-\beta)}{\sqrt{2}}$$

即 H 的本征态，本征值相应为

$$\mu_n B \text{ 和 } -\mu_n B$$



题图 11.47(b)

在 $t=0$ 时，中子刚进入磁场时，自旋方向沿 z 轴，自旋波函数为

$$\psi(0)=\alpha=\frac{\alpha+\beta}{\sqrt{2}}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}+\frac{\alpha-\beta}{\sqrt{2}}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}$$

在 H 作用下，在 t 时刻波函数为

$$\psi(t)=\frac{\alpha+\beta}{2}\exp(-\mathrm{i}\omega t)+\frac{\alpha-\beta}{2}\exp(\mathrm{i}\omega t)=\alpha\cos\omega t-\mathrm{i}\beta\sin\omega t \tag{1}$$

式中

$$\hbar\omega=\mu_n B$$

当 $t=\pi\hbar/2\mu_n B$ 时，有 $wt=\frac{\pi}{2}$，于是 $\psi(t)=-\mathrm{i}\beta$. 这时离开磁场的中子束自旋方向沿 $-z$ 轴.

(2) 当磁场沿 y 轴方向，这时 H 的本征矢为 σ_y 的两个本征矢，即

$$\frac{\alpha+\mathrm{i}\beta}{\sqrt{2}},\qquad \frac{\alpha-\mathrm{i}\beta}{\sqrt{2}}$$

本征值仍为 $\mu_n B$ 与 $-\mu_n B$ (μ_n 为中子磁矩 y 分量). 所以 t 时刻波函数为

$$\psi(t)=\frac{\alpha+\mathrm{i}\beta}{2}\exp(-\mathrm{i}\omega t)+\frac{\alpha-\mathrm{i}\beta}{2}\exp(\mathrm{i}\omega t)=\alpha\cos\omega t-\beta\sin\omega t$$

当 $wt=\frac{\pi}{2}$ 时，$\psi(t)=\beta$，离开磁场后，中子自旋方向也沿$-z$方向.

虽然这与(1)最后自旋方向相同，但自旋态却不一样，两者差一个相位因子 i，因此当和另一路不经过磁场的中子束(自旋态为α)相干叠加后，两种情况的叠加后中子束的波函数分别为

$$\psi=(\alpha-\mathrm{i}\beta)/\sqrt{2}\qquad \boldsymbol{B}\text{ 沿 }x\text{ 方向}\tag{2}$$

$$\psi=(\alpha+\beta)/\sqrt{2}\qquad \boldsymbol{B}\text{ 沿 }y\text{ 方向}\tag{3}$$

我们知道式(2)表示自旋沿$-y$轴方向，而式(3)的波函数表示自旋沿 x 轴方向.

(3) ① 当 $t=\pi\hbar/\mu_n B$ 时，$wt=\pi$ 由式(1)可知

$$\psi(t)=-\alpha$$

这时虽然自旋转过 2π，方向仍沿 z 轴正方向，但自旋波函数差一个负号，这也是纯量子效应. 对于自旋是半整数的粒子都适用. ②当 $t=2\pi\hbar/\mu_n B$ 时，$wt=2\pi$，式(1)变为

$$\psi(t)=\alpha$$

即当自旋方向转过 4π，粒子自旋波函数完全复原. 自旋波函数的符号(相位因子)仅靠一束无法被测量到，但通过二束的干涉可被测量到. ①情况下，两束中子相干相消，相干中子束强度为零；而②的情况下，相干光束相干相长，强度最大.

11.48 奇偶相干态是 a^2 (a 为湮灭算符)的本征态

题 11.48 试证明下面两种态为 a^2 的本征值为 α^2 的本征态(a 为湮灭算符，α为复常数)

$$|\alpha\rangle_{\mathrm{e}}=(\cosh|\alpha|^2)^{-\frac{1}{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^{2n}}{\sqrt{(2n)!}}|2n\rangle$$

$$|\alpha\rangle_{\mathrm{o}}=(\sinh|\alpha|^2)^{-\frac{1}{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^{2n+1}}{\sqrt{(2n+1)!}}|2n+1\rangle$$

(上面 $|\alpha\rangle_{\mathrm{e}},|\alpha\rangle_{\mathrm{o}}$ 常被称为偶相干态与奇相干态).

解

$$\begin{aligned}a^2|\alpha\rangle_{\mathrm{e}}&=(\cosh|\alpha|^2)^{-\frac{1}{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^{2n}}{\sqrt{(2n)!}}a^2|2n\rangle\\&=(\cosh|\alpha|^2)^{-\frac{1}{2}}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\alpha^{2n}}{\sqrt{(2n-2)!}}|2n-2\rangle\\&=\alpha^2(\cosh|\alpha|^2)^{-\frac{1}{2}}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{\alpha^{2m}}{\sqrt{(2m)!}}|2m\rangle\\&=\alpha^2|\alpha\rangle_{\mathrm{e}}\end{aligned}$$

类似有

$$a^2|\alpha\rangle_{\mathrm{o}}=\alpha^2|\alpha\rangle_{\mathrm{o}}$$

11.49 被约束在圆轨道上运动的粒子，在有无外磁场时的本征态、本征能量和磁矩，及它的顺磁能量与抗磁能量

题 11.49 一个质量为 m，电量为 e 的粒子被约束在一个半径为 a 的圆轨道上运动. 设 x 为沿轨道的距离，(1) 证明波函数

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi a}}\exp(\mathrm{i}nx/a),\qquad \frac{1}{\sqrt{2\pi a}}\exp(-\mathrm{i}nx/a)$$

是 Schrödinger 方程的解，相应的本征能量为

$$E_0=\frac{n^2\hbar^2}{2ma^2}$$

这里 n 为零或正整数. (2) 证明作轨道运动的粒子具有磁偶极矩

$$\mu=\pm\frac{ne\hbar}{2m}$$

(3) 当一个垂直于轨道平面的均匀磁场 $\boldsymbol{B}$ 被加在轨道上，证明磁场可以用一个矢势 $\boldsymbol{A}$ 来描述 $\boldsymbol{A}$ 的方向与圆轨道相切，它的大小为 $A=aB/2$. (4) 对于确定的 n 值，(1) 中的两个波函数仍然是新的 Schrödinger 方程的解，但相应的能量本征值为

$$E=E_0+E_1+E_2$$

这里

$$E_1=\mp\frac{n\hbar^2 j}{ma},\qquad E_2=\frac{\hbar^2 j^2}{2m},\qquad \hbar j=eA$$

(5) E_1 相应于顺磁能量，E_2 相应于逆磁能量.

解 (1) 轨道中运动粒子的 Hamilton 量为

$$H=\frac{1}{2m}p^2=-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$$

所以 Schrödinger 方程 $H\psi=E_0\psi$ 可写为

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+\kappa^2\psi=0$$

这里

$$\kappa^2=\frac{2mE_0}{\hbar^2}\tag{1}$$

方程的解是

$$\psi=C\exp(\pm\mathrm{i}kx)$$

式中 C 为常数，因为 x 与 $x+2\pi a$ 是同一点，所以有

$$\psi(x)=\psi(x+2\pi a)$$

由此可知

$$k=\frac{n}{a}\tag{2}$$

式中 n 为 0 或正整数. C 由归一化条件得出

$$\int_0^{2\pi a}|\psi|^2\mathrm{d}x = 2\pi ac^2 = 1$$

由式(1)和式(2)，可知

$$E_0 = \frac{n^2\hbar^2}{2ma^2}$$

(2) 磁偶极矩 μ 应为

$$\mu = \text{轨道面积} \times \text{电流} = \pm\frac{\pi a^2 e}{\tau} \tag{3}$$

这里 τ 是转动周期，设 v 为粒子速度，则有

$$\frac{1}{\tau} = \frac{v}{2\pi a} = \frac{p}{2\pi am} = \frac{\hbar\kappa}{2\pi am} = \frac{n\hbar}{2\pi a^2 m} \tag{4}$$

代入式(4)，有

$$\mu = \pm\frac{ne\hbar}{2m} \tag{5}$$

(3) 由 Stokes 定律与 $\boldsymbol{B} = \nabla\times\boldsymbol{A}$ 可得

$$\oint \boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{l} = \iint \boldsymbol{B}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{s} \tag{6}$$

式中：$\mathrm{d}\boldsymbol{l}$ 是沿轨道的积分线元，$\mathrm{d}\boldsymbol{s}$ 是被轨道围住的平面的面元. 因为 $\boldsymbol{B}$ 是常矢量，故式(6)右边为$\pi a^2 B$，又因为 $\boldsymbol{A}$ 与轨道相切，且大小不变，故上式左边等于 $2\pi aA$，由此可得

$$A = \frac{aB}{2}$$

即

$$\boldsymbol{A} = \frac{aB}{2}\boldsymbol{e}_\theta$$

(4) 加磁场后的 Hamilton 量为

$$H = \frac{1}{2m}(p - eA)^2 = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - eA\right)^2$$

Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + \frac{\mathrm{i}e\hbar}{m}\cdot\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x} + \frac{e^2A^2}{2m}\psi = E\psi \tag{7}$$

波函数 $\psi = \exp(qx)$ 是式(7)的解，如果 q 满足

$$-\frac{\hbar^2 q^2}{2m} + \frac{\mathrm{i}e\hbar Aq}{m} + \frac{e^2A^2}{2m} - E = 0$$

即

$$q^2 + 2uq + w = 0 \tag{8}$$

式中

$$u = -\frac{\mathrm{i}eA}{\hbar} = -\mathrm{i}j$$

$$w = \frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{e^2A^2}{\hbar^2} = k^2 - j^2 \tag{9}$$

$$k^2 = 2mE/\hbar^2 \tag{10}$$

由式(8)到式(9)，可得

$$q = -u \pm \sqrt{u^2 - w} = \mathrm{i}(j \pm k)$$

先不考虑归一化常数，我们得到

$$\psi_+(x) = \exp[\mathrm{i}(j+k)x], \qquad \psi_-(x) = \exp[\mathrm{i}(j-k)x] \tag{11}$$

由周期性边界条件 $\psi(x) = \psi(x + 2\pi a)$，可得

$$j + k = \frac{n}{a} \quad (\text{对}\psi_+), \qquad j - k = \frac{-n}{a} \quad (\text{对}\psi_-) \tag{12}$$

将式(12)代入式(11)，则(1)中的两个波函数仍是此时 Schrödinger 方程的解，但能量却不一样了，由式(10)可知对 ψ_+，有

$$K_+ = \frac{n}{a} - j, \qquad E_+ = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n}{a} - j\right)^2$$

对 ψ_-，有

$$K_- = \frac{n}{a} + j, \qquad E_- = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n}{a} + j\right)^2$$

这样有

$$E_\pm = E_0 + E_1 + E_2$$

这里

$$E_1 = \mp\frac{n\hbar^2 j}{ma}, \qquad E_2 = \frac{\hbar^2 j^2}{2m}$$

(5) 由关系式 $\hbar j = eA$ 及 $A = aB/2$，可知对于 ψ_+态有

$$E_1 = -\frac{n\hbar^2 j}{ma} = -\frac{ne\hbar}{2m}B = -\mu B$$

由式(5)可知，这正是轨道粒子原先的磁偶极子与所加的磁场的相互作用能即相应于顺磁能量. 因为 $\boldsymbol{\mu}$ 与 $\boldsymbol{B}$ 的方向相同，所以 E_1 小于零. 对于 ψ_-态，粒子沿相反方向运动，$\boldsymbol{\mu}$ 与 $\boldsymbol{B}$ 反向，相互作用能为正值. E_2 的表达式为

$$E_2 = \frac{\hbar^2 j^2}{2m} = \frac{e^2 A^2}{2m} = \frac{e^2 a^2 B^2}{8m}$$

抗磁效应是磁场引起的磁偶极子的变化与磁场本身的相互作用. 下面我们用经典的方法来计算这一相互作用能. 假设磁场由零逐渐增加到最终的 B_0 值，在磁场变化时要产生感应电场，由 Faraday 电磁感应定律有

$$\pi a^2 \frac{\mathrm{d}B}{\mathrm{d}t} = 2\pi a \varepsilon$$

式中 ε 是感生电场，其方向和 $\mathrm{d}\boldsymbol{B}$ 方向成左手螺旋关系. 如果粒子处于 ψ_+态，速度为 v，则电场引起的动量变化为

$$m\mathrm{d}v = -\varepsilon e \mathrm{d}t = -\frac{ea}{2}\mathrm{d}B \tag{13}$$

由式(3)，式(4)可知粒子的磁偶极矩为

$$\mu = \frac{\pi a^2 e}{\tau} = \frac{eav}{2}$$

所以式(13)中动量的变化引起的磁偶极矩的变化为

$$\mathrm{d}\mu = \frac{ea}{2}\mathrm{d}v = -\frac{e^2 a^2}{4m}\mathrm{d}B$$

当磁场从 0 增加到 B_0 时，总的能量改变为

$$E_{逆} = -\int_0^{B_0} B\mathrm{d}\mu = \frac{e^2 a^2}{4m}\int_0^{B_0} B\mathrm{d}B = \frac{e^2 a^2 B_0^2}{8m} \tag{14}$$

去掉式(14)中 B_0 的下标，可见 $E_2 = E_{逆}$. 因为 E_2 的公式中不包含 $\hbar$，所以再次让我们看到，在这种情况下量子与经典的结果一致.

11.50 两束基态银原子如何区分是自旋纯态还是自旋混合态

题 11.50 两束基态银原子，一束处于自旋混合态，一束为纯态. 你能用 Stern-Gerlach 实验装置检验出哪一束属于纯态或混合态吗?

解 设纯态为 $|\psi\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle$，这里 $|+\rangle, |-\rangle$ 为 S_z 的本征值为 $\pm\frac{1}{2}\hbar$ 的本征态. 若令

$$|\alpha| = \cos\frac{\theta}{2}, \qquad |\beta| = \sin\frac{\theta}{2}, \qquad 0 \leqslant \theta \leqslant \pi$$

$$\varphi = \arg\beta - \arg\alpha, \qquad \chi = \frac{1}{2}(\arg\beta + \arg\alpha)$$

则 $|\psi\rangle$ 可写为

$$|\psi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi/2}|+\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi/2}|-\rangle \tag{1}$$

式(1)表示的态正好是 $S_n = \boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{n}$ 的本征值为 $+\frac{1}{2}\hbar$ 的本征态，其中 $\boldsymbol{n} = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$. 所以对一个纯态来说，旋转 Stern-Gertach 仪器中的磁场方向总可以找到一个方向使银原子束通过时不再发生分裂，而混合态则无法做到这一点.

物理学大题典⑥/张永德主编

量子力学

张永德　柳盛典　吴　强
刘乃乐　朱栋培　范洪义　编著

科学出版社
中国科学技术大学出版社

张永德/主编

物理学大题典

量子力学

⑥

A Grand Dictionary of Physics Problems And Solutions

张永德 柳盛典 吴强
刘乃乐 朱栋培 范洪义/编著



科学出版社
www.sciencep.com
中国科学技术大学出版社

物理学大题典

20年磨一剑　30位资深教授合作的结晶
150位高才生的灵性显现

《物理学大题典》是中国科学技术大学30位资深教授长期鼎力合作的成果。这套大型大学物理题解丛书的前身是在中国物理学界久负盛名的《美国物理试题与解答》丛书。《美国物理试题与解答》是CUSPEA项目的成果，内容主要是美国名牌大学研究生院的入学试题解答。本次修订工作历时近2年，丛书除继续涵盖力、热、光、电、近代物理到四大力学全部基础物理学内容之外，还包括了原子核物理、粒子物理、凝聚态物理、等离子体物理、天体物理、激光物理、量子光学和量子信息物理等内容，大体涵盖了当前综合性大学全部本科物理课程的内容。本次修订补充了近年美国的考题、中国的考题和俄罗斯等国的考题，也有一些题目源自编委们的科研工作成果。

《物理学大题典》以先进的教育理念为指导，注重物理、注重学科交叉、注重与科研结合，富于"当代感"，是物理系师生的必备工具书。

量子力学 6

- 《力学》
- 《电磁学与电动力学》
- 《光学》
- 《原子亚原子与相对论物理学》
- 《热学、热力学、统计物理》
- 《量子力学》
- 《固体物理及物理量测量》

O-2109.0101



ISBN 7-03-014510-0
定　价：72.00 元

《物理学大题典》编委会

前　言

物理学，由于它在自然科学中所具有的主导作用，在人类文明史中，特别是在人类物质文明史中，占据着极其重要的地位. 经典物理学的诞生和发展曾经直接推动了欧洲物质文明的长期飞跃. 20 世纪初诞生并蓬勃发展起来的近代物理学，又造就了上个世纪物质文明的辉煌. 自 20 世纪末到 21 世纪初的当前时代，物理学正在以空前的活力，广阔深入地开创着向化学、生物学、生命科学、材料科学、信息科学和能源科学渗透和应用的新局面. 在本世纪里，物理学再一次直接推动新一轮物质文明飞跃的伟大进程已经开始.

但是，发展到目前的物理学宽广深厚，累积的知识浩瀚无垠. 教授和学习物理学都是一个相当艰苦而漫长的过程. 在这个漫长过程的许多环节中，做习题是其中必要而又重要的环节. 做习题是巩固所学知识的必要手段，是深化拓展所学知识的重要练习，是锻炼科学思维的体操. 习题对于教师和学生双方都是重要的.

然而，和习题有关的事都是很不起眼的事. 在有些人眼中，求解和编纂练习题是全部教学活动中相当次要的环节. 习题集也确实是所有著作中“最低层”的，是大约只有“傻子”们才肯做的事，“聪明人”常会找诸如习题集不应当出之类的理由，光明正大地规避掉.

但是，在教授和学习过程中，只要是需要的，都是合理的，也总得有人去做才行. 于是我们编委会的这些人，本着甘为孺子牛的精神，平时在科研和教学中一道题一道题地积累，现在又一道题一道题地编审，花费了大量时间做着这种不起眼的事. 大家觉得，这件事终究是教与学双方共同需要的，也就是有益的. 正如一个城市基础建设中，不能都去做地面上的摩天大楼和纪念碑等“抢眼球”的事，也还需要做诸如修建马路、下水道等基础设施的事.

这套《物理学大题典》的前身是中国科学技术大学出版社出版的《美国物理试题与解答》丛书(7 卷). 那套丛书于 20 世纪 80 年代后期由张永德发起并组织完成，内容包括普通物理的力、热、光、电、近代物理到四大力学的全部基础物理学. 出版时他选择了“中国科学技术大学物理辅导班主编”的署名方式. 自那套丛书出版之后，虽历经 10 余年，仍然有不断的需求，于是就有了现在的这套丛书——《物理学大题典》.

现在这套《物理学大题典》丛书的内容，除继续涵盖力、热、光、电、近代物理到四大力学全部基础物理学内容之外，还包括了原子核物理、粒子物理、凝聚态物理、等离子体物理、天体物理、激光物理、量子光学和量子信息物理等内容. 就是说，追踪不断发展的科学轨迹，现在这套丛书仍旧大体涵盖了综合性大学全部本科物理课程的内容.

这次重新编审中，大部分教师仍为原来的，但也增加了一些新的成员. 这次出版经大家着力重订和大量扩充，又耗时近两年而成. 总计起来，这套丛书前后历时近 20 年，耗费了 30 余位富有科研和教学经验的教授、近 150 位 20 世纪 80 年代和现在的研究生及高年级本科生的巨大辛劳. 丛书确实是大家长期共同劳动的结晶.

《物理学大题典》中包括了大量的美国物理试题. 一般说来，美国物理试题涉及的数

学并不繁难，但却或多或少具有以下特色：内容新颖，富于“当代感”；思路灵活，涉及面宽广；方法和结论简单而实用，试题往往涉及新兴和边沿交叉学科；不少试题本身似乎显得粗糙但却抓住了物理本质，显得“物理味”很足. 纵观这些，我们深切感到，这些题目的集合在一定程度上体现了美国科学文化的个性及思维方式的特色. 惟鉴于此，我们不惮繁重，集众多人力而不怯，耗漫长岁月而不辍，还是值得的.

至于这次扩充修订所增添的大量题目，也是本着这种精神，摘自大家各自的科研工作成果，或是来自各人的教学心得，实是点滴聚成.

这里要强调指出，对于学生，确实有一个如何正确使用习题集的问题. 有的同学，有习题集也不参考，咬牙硬顶，一个晚上自习时间只做了两道题. 这种精神诚应嘉勉，但效率不高，也容易挫伤学习积极性，不利于培养学习兴趣；也有的同学，逮到合适解答提笔就抄，这样做是浮躁的、不踏实的. 这两种学习方法都不可取. 我们认为，正确使用习题集是一个“三步曲”过程：遇到一道题，先自已想一想，想出来了自己做最好；如果认真想了一些时间还想不出来，就不要老想了，不妨翻开习题集找答案，看懂之后，合上书自己把题目做出来；最后一步，要是参考习题集做出来的，就用一两分钟时间分析解剖一下，找找自己存在的不足，今后注意. 如此“三步曲”下来，就既有效率又踏实了. 本来，效率和踏实是一对矛盾，在这类“治学小道”之下，它俩就统一起来了. 总之，正确使用之下的习题集肯定能够成为学生们有用的“爬山”工具.

丛书这次重订扩充工作是在科学出版社胡升华博士的倡议和支持下进行的，没有他的推动，这套丛书面世是不可能的. 同时，在这次重订扩充工作里，我们得到了中国科学技术大学的部分教学资助，以及编委会中郭光灿和周又元两位院士和刘万东教授的支持. 对于这些宝贵的支持，谨表示深切感谢.

《丛书》的最子力学卷共计 11 章，题目总数由原来 380 道增扩为 707 道. 题目来源是一些国际著名大学(包括哥伦比亚大学、加州大学伯克利分校、麻省理工学院、威斯康星大学、芝加哥大学、普林斯顿大学、纽约州立大学布法罗分校)的试题和习题，CUSPEA 考试、丁肇中考试试题，一些量子力学习题集(作者分别是 H. Mavromatis, G. L. Squires, D ter Haar, 康斯坦丁内斯库等，B . M. Галицкий 等，以及钱伯初等)，部分量子力学教材(朗道、张永德、曾谨言等)，另有相当一部分是我们自拟的.

前后近 20 年中，参加本卷解题的人有任勇、戴铁生、萧旭东、周苏闽、王力军、何小东、孟国武、斯其苗、袁卡佳、何广梁、缪凌、康绍强、张洪、陈一新、杨仲侠、宁铂、吴盛俊、周锦东、赵博、赵梅生、杨洁、张强等. 其间也听取过马雷、唐忠、潘建伟、刘乃乐、吴建达等人的意见. 为了丛书行文简洁，书中不再另行指出他们姓名. 另外，戴铁生、郁司夏、赵博、赵梅生、杨洁、张强、曾树祥和王立志分别承当过部分审校、抄写和计算机输入工作. 编写期间曾承俞礼钧教授提供过资料. 本卷前 5 章由柳盛典负责编写，后 6 章由吴强负责编写，然后再经交换审阅. 全书由张永德统稿并断续地校阅过.

编审者谨识

2005 年 5 月

题意要览

1.1　几个常见数值.
1.2　基本量的数值估计.
1.3　几个重要数值的量级.
1.4　几个重要实验的意义.
1.5　电子的双缝干涉.
1.6　电子、中子、光子的 de Broglie 波长.
1.7　原子的稳定性.
1.8　光子衰变.
1.9　电子偶素的衰变.
1.10　光波的反射与折射.
1.11　de Broglie 波的相速与群速.
1.12　考虑相对论修正后电子的 de Broglie 波长.
1.13　de Broglie 波长的计算.
1.14　电子显微镜的分辨率.
1.15　波函数的归一化.
1.16　粒子的径向分布与角分布.
1.17　验证不确定性关系.
1.18　利用不确定性关系，估计无限深方势阱中的粒子的基态能量.
1.19　波函数的归一化及 $\overline{x^2}$ 、 $\overline{p^2}$ 的计算.
1.20　自由粒子动量和动能平均值的计算.
1.21　流密度算符.
1.22　电子 Young 双缝实验与测量公设.
1.23　测量公设例(1).
1.24　测量公设例(2) .
1.25　测量公设例(3) .
1.26　能量守恒.
1.27　一维束缚态无简并.
1.28　一维束缚态的性质.
1.29　宇称(空间反演)算符.
1.30　在 Hamilton 量定态分立谱中动量的平均值恒为零.
1.31　广义 Virial 定理.
1.32　广义 Hellmann-Feynman 定理.
1.33　$\left[\hat{A},\hat{B}\right]_+=0$ 时，在 Hermite 算符 $\hat{A}$ 的分立谱本征态下 $\hat{B}$ 的平均值为零.

5.2 $\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}$ 和 $\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{L}}{\mathrm{d}t}$.

5.3 自由电子在外磁场中的 Hamilton 量.

5.4 带电粒子在均匀磁场中运动的轨道中心算符.

5.5 带电粒子在均匀磁场中运动的轨道中心算符和轨道半径的本征值谱.

5.6 电荷密度和电流密度算符.

5.7 带电粒子在均匀磁场及三维各向同性谐振子势场中的能谱.

5.8 限制在圆周上的带电粒子处于磁场中时的能级.

5.9 磁通量量子化.

5.10 对称规范与不对称规范.

5.11 Pauli 提出的全面地反映电子在电磁场中的运动的 Hamilton 量.

5.12 带电粒子受均匀电场作用时的含时 Schrödinger 方程.

5.13 处于均匀磁场中无自旋带电粒子的能级.

5.14 带电粒子在恒定相互垂直电磁场中运动.

5.15 中子的旋量干涉.

5.16 Aharonov-Bohm 效应.

5.17 将 Bohr-Sommerfeld 关系推广应用到有电磁场存在的情况.

5.18 规范变换对波函数的影响.

5.19 三维刚性盒中电子受一均匀磁场作用时的能级.

5.20 导体圆环处于磁场中，在此环中运动电子的基态与外磁场的关系.

5.21 时间反演不变时，波函数的时间反演形式.

5.22 有自旋的带电粒子在均匀磁场中低速运动时的 Hamilton 量.

5.23 中子干涉问题.

5.24 处于 2p 态氢原子在外磁场中，计算 $\langle L_z \rangle$.

5.25 不带电荷磁矩为 μ 粒子被约束在$(-L, L)$的无限深势阱中，在 $x<0$ 区加磁场 $B_0\mathbf{e}_z$，在 $x>0$ 区加磁场 $B_0\mathbf{e}_x$，求能量本征态及能级方程.

5.26 带电粒子在磁通为 ϕ 的长螺线管穿过半径为 R 的双环中运动时，能级及本征函数.

6.1 用微扰论计算椭球状刚性势阱中基态能量修正.

6.2 微扰论计算切去一角的无限深阱中前三态的能量修正.

6.3 微扰论计算一维谐振子基态能量的相对论修正.

6.4 Coulomb 场中电子在微扰势 $V_{微扰} = f(r)xy$ 作用下，能级的变化.

6.5 一维无限深势阱中有一小势阱时的基态能量一级修正.

6.6 微扰论计算有两个小势垒的无限深势阱中能量一级修正.

6.7 微扰论计算有一个小势垒的无限深势阱中的基态能量.

6.8 微扰势 $\delta V = \frac{\lambda}{x^2 + a^2}$，一维谐振子基态的能量修正.

6.9 弹性球在缓慢移动墙之间运动时能量随时间的变化.

6.10 在一维无限深阱中突然加上方势垒后电子的跃迁.

6.11 一维带电谐振子放入电场后基态能量的移动.

6.45 氢原子处于相互垂直的电、磁场中，求决定能移的方程.

6.46 用微扰论证明单电子原子在磁场中的能量改变.

6.47 $n=2$ 的氢原子在静电场 ε 中能级的分裂及讨论.

6.48 假定上题中的 u_{210} 和 u_{200} 具有不同的能级 $E^0+\Delta$，$E^0-\Delta$，证明 $H^{(0)}+H^{(1)}$ 相应的矩阵有本征值 $E^0\pm\sqrt{A^2+\Delta^2}$.

6.49 核视为带电球壳时绕铅核转动的 μ^- 介子的基态能量变化.

6.50 以 $e^{-\beta r}$ 为尝试波函数，用变分法求氢原子基态能级上限.

6.51 处于一维盒中的两个非全同粒子，在相互作用势 $\lambda\delta(x_1-x_2)$ 的零级波函数及一级能移.

6.52 三能级系统在微扰 Hamilton 量 λH 下的能量最低级修正.

6.53 在三维谐振子势中两全同 Fermi 子在 $-\lambda\delta^3(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)$ 势作用下的零级波函数和能量一级修正.

6.54 Schwinger 表示下的角动量的本征态与本征值及其在微扰 $\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{J}$ 下简并的解除.

6.55 求二维谐振子在势 $\frac{1}{2}\varepsilon xy(x^2+y^2)$ 下的一阶微扰效应.

6.56 用微扰论计算 $V=\frac{1}{2}k(x^2+y^2+z^2+\lambda xy)$ 中的能级.

6.57 两原子由相互作用势 $V_{12}=\beta\frac{x_1x_2e^2}{d^3}$ 作用时的零级波函数和一级能量修正.

6.58 三维各向同性谐振子在微扰 $H'=bxy$ 下的能级分裂.

6.59 微扰 $H'=\mathrm{i}\lambda[A,H_0]$ 作用下，算符的基态平均值.

6.60 三维谐振子在微扰 $\Delta V=kxyz+\frac{k^2}{\hbar\omega}x^2y^2z^2$ 下基态能量修正.

6.61 自旋1/2的三维谐振子在微扰 $\lambda\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}$ 下的基态能量修正.

6.62 球形腔内的粒子在弱磁场，弱电场及极强磁场中基态能量修正.

6.63 三维谐振子在均匀电场，均匀磁场中能级的简并度及能量变化.

6.64 原子在弱磁场及强磁场中的能级分裂.

6.65 单价电子原子在弱、强磁场中的能级分裂.

6.66 电子偶素在 $H_0+A\boldsymbol{S}_\mathrm{p}\cdot\boldsymbol{S}_\mathrm{e}-(\boldsymbol{\mu}_\mathrm{p}+\boldsymbol{\mu}_\mathrm{e})\cdot\boldsymbol{B}$ 作用下的本征函数及能量.

6.67 磁场作用远小于精细结构作用时，原子的能量变化.

6.68 氘核在 $H=\frac{p^2}{2\mu}+V_1(r)+\boldsymbol{\sigma}_\mathrm{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}_\mathrm{n}V_2(r)+\left[\left(\boldsymbol{\sigma}_\mathrm{p}\cdot\frac{\boldsymbol{x}}{r}\right)\left(\boldsymbol{\sigma}_\mathrm{n}\cdot\frac{\boldsymbol{x}}{r}\right)-\frac{1}{3}(\boldsymbol{\sigma}_\mathrm{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}_\mathrm{n})\right]V_3(r)$ 作用下的角动量及视 $V_3(r)$ 为微扰时的能级移动.

6.69 受有心力场作用的两个自旋 1/2 全同粒子系统在微扰 $H'=\lambda[3\boldsymbol{\sigma}(1)\cdot\hat{\boldsymbol{r}}\boldsymbol{\sigma}(2)\cdot\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{\sigma}(1)-\boldsymbol{\sigma}(2)]$ 下的能级修正.

6.70 氢原子的超精细结构态在与时间相关的弱磁场中的变化.

6.71 受到电场 $\boldsymbol{E}=E_0\sin\omega t\boldsymbol{e}_z$ 作用后，中心场中的粒子 S，P 态被占据的概率.

6.72 $H=\alpha\left(L_x^2-L_y^2\right)/\hbar^2+\beta BL_z/\hbar$ 在基 $|L,M_L\rangle$ 上的矩阵元与被作用离子的能级.

7.20 核子被一重核(散射势为吸引球方势阱)的弹性散射.
7.21 用 Born 近似计算粒子在球对称分布电荷的静电势场中的散射问题.
7.22 用 Born 近似计算粒子在 $V = Ae^{-r^2/a^2}$ 中的散射截面.
7.23 用 Born 近似计算粒子在球方势阱中的散射截面.
7.24 已知散射截面曲线 $\dfrac{d\sigma(\theta)}{d\Omega}$ 回答散射势的力程与行为.
7.25 用 Born 近似计算散射势 $V = \dfrac{qQ}{r}e^{-\alpha r}$ 的散射截面.
7.26 用 Born 近似计算 $V(r) = V_0 e^{-r/a}$ 下的散射截面.
7.27 用 Born 近似计算 $V(r) = \beta\dfrac{e^{-\alpha r}}{r}$ 下的散射截面.
7.28 求证球对称势 $V(r) = \dfrac{\beta}{r}e^{-\gamma r}$ 下的微分散射截面，并推导 Rutherford α 粒子散射公式.
7.29 求解金箔对 α 粒子的散射，由此求金的原子序数.
7.30 求解中子束在 20℃ 干燥空气中行进 1m 后的衰减.
7.31 中子束被球对称方势阱散射的散射长度与总散射截面.
7.32 材料的折射率与全反射临界角.
7.33 热中子 + 质子 $\rightleftharpoons$ 氘核 + 光子，求一盒中两种过程的截面比.
7.34 1keV 质子被氢原子散射时的散射截面.
7.35 根据高能电子被核散射的结果考虑核电荷的分布.
7.36 Ramsauer-Townsend 效应的起源及低能电子的最大散射截面.
7.37 由光在介质中被一散射中心引起的散射振幅推导色散关系.
7.38 两个自旋粒子在作用势 $H_{\text{int}} = A\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 \dfrac{e^{-\mu r}}{r}$ 下的散射截面.
7.39 用 Born 近似计算中子-中子散射的散射截面.
7.40 低能中子在质子上的散射与不同自旋态的关系.
7.41 $V(r) = \begin{cases} \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 V_0, & r \leqslant a \\ 0, & r > a \end{cases}$，计算总散射截面.
7.42 自旋 1/2 的粒子束被重核散射，散射势为 $C\boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2 \delta^{(3)}(x_1 - x_2)$ 求散射截面.
7.43 两个自旋 1/2 的全同粒子在屏蔽 Coulomb 势 $e^2\dfrac{e^{-\lambda r}}{r}$ 下的散射截面.
7.44 Born 近似计算电子在散射势 $V = e^{-\mu r^2}(A + B\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{r})$ 下的散射截面.
7.45 入射粒子 P_2 被处于束缚态的粒子 P_1 在相互作用势 $V(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') = V_0 b^3 \delta^3(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')$ 下的散射振幅.
7.46 已知弹性散射总截面，求共振角动量与共振时 $\theta = 180^\circ$ 的微分散射截面.
7.47 低能中子被一核子系统散射求散射长度.
8.1 关于吸收或发射一个光子的原子态在电偶极作用时的选择定则.
8.2 无限深势阱中处于 $n = 1$ 态的电子在 $E(t)$ 作用下跃迁到 $n = 2, 3$ 的概率.

8.36 质子系统在恒磁场及旋转磁场作用下，系统的自旋波函数.

8.37 处于叠加态的谐振子在激光电磁场作用下的跃迁概率.

8.38 处于 2s 与 2p 叠加态.

8.39 氢原子 $1s^3S_1$ 与 $1s^1S_0$ 态之间的超精细分裂及辐射跃迁矩阵元.

8.40 在磁场 $B_x = B_0\cos\omega t, B_y = B_0\sin\omega t, B_z =$ 常数 $(B_0 \ll B_z)$ 作用下自旋态的跃迁.

8.41 关于核磁共振的一些问题.

8.42 在势 $V = \begin{cases} -\dfrac{\beta}{x}, & x>0 \\ \infty, & x<0 \end{cases}$ 中的束缚态电子对平面光波的吸收截面.

8.43 同一 Hamilton 量下引起的跃迁概率 $P_{k\to j}(t) = P_{j\to k}(t)$.

8.44 一恒温盒中一组仅有两个非简并态的全同原子.

8.45 氢原子通过电偶极辐射到基态，辐射的相对频率宽度数量级.

8.46 超导 Josephson 结的隧道电流与加稳定电压后的隧道电流.

8.47 两个具有弹性力与自旋相互作用的自旋为 1/2 的可分辨粒子在 $V(t) = \left(V_1 + V_2\dfrac{z_1 - z_2}{L}\right)f(t)\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{n}$ 作用下的跃迁概率幅.

9.1 两个无相互作用的可区分粒子分别受力 $-Kx_i$ 吸引，求本征函数与本征值.

9.2 两个全同线性振子在相互作用势 $H = \varepsilon x_1 x_2$ 下的精确能级.

9.3 一维谐振子势阱中两个全同粒子的基态波函数.

9.4 两个相互之间以弹性力联系的谐振子.

9.5 用一高势垒隔开的无限深方势阱中的两全同 Bose 子.

9.6 以弹性力相联系的两粒子体系的对称性及基态波函数.

9.7 处于谐振子势中的两全同 Bose 子通过 $V_{\text{int}}(x_1, x_2) = \alpha e^{-\beta(x_1-x_2)^2}$ 相互作用.

9.8 由两个全同粒子组成的系统中，对称态与反对称态的数目比.

9.9 无限深势阱中的两个无相互作用粒子.

9.10 各向同性谐振子势中的两个无相互作用粒子.

9.11 $\rho^0 \to \pi^0 + \pi^0$ 的衰减过程是不可能的.

9.12 π^- 介子与氘核作用形成的两个中子的状态和宇称.

9.13 无限深方势阱中几个电子的平均能量.

9.14 两个在有心势阱中运动的电子.

9.15 两个全同 Fermi 子处于一维无限深势阱中时的三个最低能量.

9.16 一维盒子中相互作用势为 $a\delta(x_1 - x_2)$ 的两个无自旋粒子.

9.17 相互作用为 $H = A(\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2 - 3S_{1x}S_{2x})$ 的两个固定电子.

9.18 两全同 Fermi 子形成的系统.

9.19 两个粒子在同一谐振子势中以弹性力相互作用.

9.20 两粒子体系的最低总能量、能级简并度和相应的波函数.

9.21 两个在中心场中运动的电子.

9.22 氢分子的转动能级.

11.29 中微子振荡与测量.
11.30 用近似法求周期势中电子的能级及能带宽度.
11.31 求被铝原子俘获的μ子的能级、平均半径.
11.32 用中子干涉仪测重力加速度.
11.33 一维 Dirac 方程可以写成两个耦合的一阶偏微分方程组.
11.34 自由粒子的 Dirac 方程及其平面波解.
11.35 由自由实标量场的 Lagrange 密度导出 Klein-Gordon 方程.
11.36 初动量为 P 的质壳上的带电粒子发射虚光子的概率为一协变张量.
11.37 证明 Dirac 方程的协变性，并改成 Hamilton 形式.
11.38 同位旋矢量算符的性质及多核子系统的能量本征态与本征值.
11.39 等边三角形分子俘获额外电子后的能量本征态及其性质.
11.40 用变分法求分子的基态能量及动能、势能的平均值.
11.41 绝热近似下的双原子分子的本征函数与本征值.
11.42 用 Schwarz 不等式证明不确定性原理，并证明最小不确定性态是 Gauss 函数.
11.43 热平衡中的一维谐振子(混态)的位置概率函数.
11.44 带电粒子在均匀磁场中运动时的产生、湮灭算符及能级.
11.45 相干态随时间的演化.
11.46 求 N 个离子组成的环在自旋相互作用下的本征态与本征能量.
11.47 中子干涉仪中最终干涉强度与其中一路磁场的关系.
11.48 奇偶相干态是 a^2 (a 为湮灭算符)的本征态.
11.49 被约束在圆轨道上运动的粒子，在有无外磁场时的本征态、本征能量和磁矩，及它的顺磁能量与抗磁能量.
11.50 两束基态银原子如何区分是自旋纯态还是自旋混合态.

内 容 简 介

《物理学大题典》是一套大型工具性、综合性物理题解丛书。丛书内容涵盖综合性大学全部本科物理学内容：从普通物理的力学、热学、光学、电学、近代物理到“四大力学”，以及原子核物理、粒子物理、凝聚态物理、等离子体物理、天体物理、激光物理、量子光学、量子信息等。内容新颖、注重物理、注重学科交叉、注重与科研结合。

《量子力学》卷包括量子力学基础、一维定态问题、中心力场束缚态问题、轨道及自旋角动量、带电粒子在电磁场中的运动、定态近似问题、散射、含时近似方法与跃迁、少体问题以及量子信息等内容。

本丛书可做为物理类本科生的学习辅导用书、研究生的入学考试参考书和各类高校物理教师的教学参考书。

图书在版编目(CIP)数据

量子力学/张永德等编著.—北京：科学出版社；合肥：中国科学技术大学出版社，2005

(物理学大题典⑥/张永德主编)

ISBN 7-03-014510-0

I.量… II.张… III.量子力学-解题 IV.O2109

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2004)第 108824 号

策划编辑：胡升华 / 文案编辑：贾瑞娜 / 责任校对：赵桂芬

封面设计：张 放 / 责任印制：钱玉芬

科学出版社 出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码：100717

http://www.sciencep.com

中国科学技术大学出版社

安徽省合肥市金寨路 96 号

邮政编码：230026

中国科学院印刷厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2005 年 9 月第 一 版 开本：787×1092 1/16

2005 年 9 月第一次印刷 印张：48 1/4

印数：1～5 000 字数：1 095 000

定价：72.00 元

(如有印装质量问题，我社负责调换〈科印〉)